

14
1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIV. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Kereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A KVANTUMTÉRELMELET ALAPELVEI ÉS LEGÚJABB EREDMÉNYEI III*

ANALITIKUS TULAJDONSÁGOK

PÓCSIK GYÖRGY

ELTE, Elméleti Fizikai Intézet

1. §. Bevezetés

A Wightman-függvények különféle analitikus kiterjesztéseit fogjuk tanulmányozni. Retardált függvényekre sok analóg kiterjesztés bizonyítható [1], ezeket nem vizsgáljuk.

Az analitikus tulajdonságok két szempontból fontosak. 1. Lehetővé teszik a lineáris program kiépítését. Ennek lényege az, hogy a függvények holomorfitási tartományait meghatározzuk és Cauchy-integrál képletére emlékeztető módon, a függvényeket kerületi értékeikből állítjuk elő [2]. A lineáris program a nemlineárisal kiegészítve támaszkodik az összes axiómára. A nemlineáris program [3] az aszimptotikus teljességre támaszkodik, ez a vákuumértékek közt nemlineáris integrálegenletekre vezet. Mindkét programban nagy technikai nehézségek lépnek fel. 2. Az analitikus tulajdonságok, mint hasznos segédeszközök is jelentősek. Valóban, az axiómatikában kimondott fizikai tételeket az analitikus tulajdonságok segítségével lehet bizonyítani.

Az előző dolgozatokból kiindulva [4], a Wightman-függvények következő kiterjesztéseihez jutunk el: 1. kiterjesztés a permutált csövekbe és azok egyesítésébe (2. §), 2. kiterjesztés a kiterjesztett permutált csövekbe és azok egyesítésébe (3—4. §). Megvizsgáljuk a kiterjesztett permutált csövek valós regularitási helyeit, a Jost-pontokat is (4. §).

A felhasznált tételeket (a mérsékelt disztribúció Laplace transzformáltjáról, valamint a sokváltozós komplex függvényekről) a Függelékben foglaltuk össze.

A következő részben fizikai alkalmazásokkal foglalkozunk.

2. §. Analitikus kiterjesztés a permutált csőbe

Láttuk, hogy a $w_\mu^k(x)$ disztribúció transláció invariáns, így $w_\mu^k(x_0 \dots x_n) = \mathcal{W}_\mu^k(\xi_1 \dots \xi_{n-1})$, $\xi_i = x_i - x_{i+1}$ [4]. Továbbá a megfelelő \tilde{W}_μ^k ill. $\tilde{\mathcal{W}}_\mu^k$ Fourier transzformáltak mérsékelt disztribúciók és

$$\tilde{W}_\mu^k(q_0 \dots q_n) = (2\pi)^4 \delta(q_0 + \dots + q_n) \tilde{\mathcal{W}}_\mu^k(q_0 \dots \sum_{i=0}^{n-1} q_i). \quad (1)$$

Tekintsük $\tilde{W}_{\mu,p}^k(q)$ Laplace transzformáltját (3. Függelék), $\mathcal{L}(\tilde{W}_p) = \mathcal{F}(\exp(\text{Im}(q, z) \tilde{W}_p))$, részletesen

$$w_{\mu,p}^k(z) = (2\pi)^{-4(n+1)} \int e^{-i(q,z)} \tilde{W}_{\mu,p}^k(q) dq_0 \dots dq_n, \quad (2)$$

$$(q, z) = \sum_{i=0}^n (q_i, z_i).$$

* Érkezett 1955. márc. 13.

Fennáll

$$\begin{aligned}
 w_{\mu, p}^k(z) &= (2\pi)^{-4(n+1)} \int e^{-\sum_0^n (q_{P(i)}, z_{P(i)})} (2\pi)^4 \cdot \\
 &\cdot \sigma(P, k) \delta \left(\sum_0^k q_{P(i)} \right) \tilde{\mathcal{W}}_{P\mu}^{Pk} \left(q_{P(0)} \dots \sum_0^{n-1} q_{P(i)} \right) dq_{P(0)} \dots dq_{P(n)} = \\
 &= (2\pi)^{-4n} \sigma(P, k) \int dQ_0 \dots dQ_{n-1} \tilde{\mathcal{W}}_{P\mu}^{Pk}(Q_0 \dots Q_{n-1}) \cdot \\
 &e^{-i \sum_0^{n-1} (Q_i, z_{P(i)} - z_{P(i+1)})} \equiv W_{\mu}^k(z_{P(0)} - z_{P(1)}, \dots, z_{P(n-1)} - z_{P(n)})_P.
 \end{aligned} \tag{3}$$

A következő lényeges állítást látjuk be:

I. $w_{\mu, p}^k(z)$ ill. $W_{\mu}^k(\zeta)_p$ holomorf a $z = (z_j)$ ill. $\zeta = (z_{p(j)} - z_{p(j+1)})$ változóban a

$$T_p = \{z \mid \text{Im}(z_{p(i)} - z_{p(i+1)}) \in V_-; i=0, \dots, n-1\}$$

ill.

$$T_{p,n} = \{\zeta \mid \text{Im}(z_{p(i)} - z_{p(i+1)}) \in V_-; i=0, \dots, n-1\} \tag{4}$$

permutált csőben, $V_- = V_-^0$ a múlt kúp belseje.

Az állítás a spektrum feltételén múlik. Először szemléletesen nézzük (2), (3)-at. A spektrum feltételből láthatóan $z \in T_p$, $\zeta \in T_{p,n}$ -re $\text{Im}(q, z) \rightarrow -\infty$, ha $q \rightarrow \infty$ a $\tilde{\mathcal{W}}$ tartójában, ezért itt $\exp(-i(q, z))$ egy \mathcal{S} -beli függvénynek tekinthető, (3) a ζ változót tartalmazó véges disztribúció. (3) ζ -ban folytonos és $(z_{p(i)} - z_{p(i+1)})$ -ben holomorf, így $T_{p,n}$ -ben ζ -ban holomorf. De akkor $w_{\mu, p}^k(z)$ -re is igaz az állítás (A holomorfitásra nézve: 1. Függelék.)

A pontos bizonyítás Schwartz Laplace transzformáltra vonatkozó tételén alapszik (3. Függelék). Ez közvetlenül alkalmazható; a jelölés megfeleltetése: $x \rightarrow q$, $p \rightarrow iz$, $\Gamma + iR^n \rightarrow -i T_p$; analóg (3)-nál. A lényeg tehát az, hogy a Fourier transzformált tartója az előre kúp, így Γ -t hátrakúpok szorzataként kell választani, hogy $\mathcal{L}(\tilde{W}_p)$ -nek értelme legyen. Ekkor az állítás automatikusan igaz. (Pontosabban először mindig $T_{p,n}$ -re és (3)-ra következik, abból (2)-re.)

II. Ha $\text{Im}(z_{p(i)} - z_{p(i+1)}) V_-$ kompakt részhalmazában van, akkor $w_{\mu, p}^k(z)$ a $\text{Re } z$ polinomja alatt marad. Sőt a spektrum-feltétel miatt $w_{\mu, p}^k(z)$ még erősebben is megszorítható. Minthogy \tilde{W}_p mérsékelt disztribúció, további megszorítás adódik $w_{\mu, p}^k(z)$ -re: a valós tengely közelében $w_{\mu, p}^k(z)$ polinomnál nem nőhet gyorsabban. Mindezeket a korlátozásokat a 3. Függelékben tárgyaljuk részletesen.

Tulajdonképpen ezek a tulajdonságok indokolják, hogy csak renormálható elméletek Wightman-függvényei tárgyalhatók megfogalmazásunkban. Valóban, nem-renormálható elméletekben, pl. a koordináta rendszer origójában polinomnál erősebb növekedések lépnek fel. Egy ilyen elméletben tehát a Wightman-függvény nem lehet mérsékelt disztribúció az \mathcal{S} -téren.

III. Fordított tulajdonság: Ha $w_{\mu, p}^k(z)$ valamilyen z -ben a T_p csőben holomorf függvény, akkor $\text{Im } z \rightarrow 0$ (a T_p -ből) határértéke disztribúcióként létezik, azaz $f \in \mathcal{D}$ -re

$$\lim_{\substack{y \rightarrow 0 \\ x + iy \in T_p}} \int w_{\mu, p}^k(x + iy) f(x) dx \equiv w_{\mu, p}^k(f) \in D^* \tag{5}$$

Ha $w_{\mu,p}^k(z)$ kielégíti a II. alatti feltételeket is, akkor a $w_{\mu,p}^k(f)$ „kerületi érték” mérsékelt disztribúció és tartója a lezárt előrekúpban, \bar{V}_+ , van. Természetesen, ha $w_{\mu,p}^k(z)$ -t (2)-vel definiáljuk, akkor kerületi értéke Wightman-disztribúció.

Az első állítás Schwartz-tételének második részével azonos, a többi pedig a II-ben felsorolt tételek (3. Függelék) megfordításainak kombinálása.

A spektrum feltételből adódó kiterjesztés után a lokális kommutativitásból adódót vizsgáljuk.

Legyen P, P' két permutáció és $P' = P_{(l, i+1)}$ [4]. Tekintsük a megfelelő permutált csöveket: $T_p, T_{p'}$. Ha T_p -ben az $\text{Im } z_{p(i)} \leftrightarrow \text{Im } z_{p(i+1)}$ cserét hajtjuk végre, akkor a T_p -be írt feltételekhez jutunk. Ezért a két cső lezárásai egy alacsonyabb dimenziós csőben, $T(S(P, i))$, érintkeznek

$$T(S(P, i)) = \{z \mid \text{Im } z \in S(P, i)\} \quad (6)$$

$$S(P, i) = S(P', i) = \{x \mid x_{p(i)} = x_{p(i+1)},$$

$$x_{p(j)} - x_{p(j+1)} \in V_-; j \neq i\}.$$

Ha $z \in T(S(P, i))$, akkor $w_{\mu,p}^k(z)$ és $w_{\mu,p'}^k(z)$ így $f(z) = w_{\mu,p}^k(z) - w_{\mu,p'}^k(z)$ disztribúció $\text{Re}(z_{p(i)} - z_{p(i+1)})$ -ben, de analitikus függvény a többi változóban. $f(z)$ -hez úgy jutottunk, hogy teljesen analitikus $w_p, w_{p'}$ függvények kerületi értékeit vontuk ki T_p ill. $T_{p'}$ -ből a „határ cső” egy pontjához tartva. Ha $T(S(P, i))$ -ből $z \rightarrow x$, akkor $f(z) \rightarrow f(x) = w_{\mu,p}^k(x) - w_{\mu,p'}^k(x)$ (disztribúció x -ben). Ha $f(x)$ -et egy $g(x_{p(i)} - x_{p(i+1)})$ próbafüggvénnyel kiintegráljuk és $g=0$ $(x_{p(i)} - x_{p(i+1)})^2 \cong 0$ -ra, akkor a lokális kommutativitás miatt 0-t kapunk, ezért $f(z)$ -t ugyancsak g -vel kiintegrálva is 0-t kapunk ($z \in T(S(P, i))$). Tehát

IV. $w_{\mu,p}^k(z) = w_{\mu,p'}^k(z)$, feltéve, hogy $(x_{p(i)} - x_{p(i+1)})^2 < 0$ és $\text{Im } z \in S(P, i)$.

Ennél sokkal több is igaz:

V. A $w_{\mu,p}^k(z)$ -k egyetlen $w_{\mu}^k(z)$ holomorf függvényt alkotnak, mely holomorf a valós x pontok, ahol $(x_{p(i)} - x_{p(i+1)})$ térszerű, komplex környezetének és $T_p \cup T_{p'}$ konvex lezárásának közös részében. Röviden: a Laplace transzformálnak a permutált csövek egyesítésébe analitikus kiterjesztése van. Ilyen módon akárhány permutált cső egyesítésébe is kiterjeszthetjük $w_{\mu,p}^k(z)$ -t.

Az állítás az „edge of wedge”-tételből (4. Függelék) közvetlenül adódik. Ugyanis $w_{\mu,p}^k(z)$ ill. $w_{\mu,p'}^k(z)$ T_p ill. $T_{p'}$ -ben holomorf és térszerű $(x_{p(i)} - x_{p(i+1)})$ -re kerületi értékeik megegyeznek, ekkor azonban az említett tétel éppen az V. állítást biztosítja.

VI. Fordított tulajdonság: Ha $w_{\mu}^k(z)$ rendelkezik az V. tulajdonsággal, valamint a III-nak is eleget tesz, akkor kerületi értéke, $w_{\mu,p}^k(x)$, mérsékelt disztribúció, mely a spektrum feltételt és a lokális kommutativitást teljesíti.

Ugyanis T_p ill. $T_{p'}$ -ben $w_{\mu}^k(z)$ éppen $w_{\mu,p}^k(z)$ ill. $w_{\mu,p'}^k(z)$. Az $(x_{p(i)} - x_{p(i+1)})$ -et térszerűen tartva, tartsunk z -vel $T(S(P, i))$ -be, akkor $w_{\mu,p}^k(z) = w_{\mu,p'}^k(z)$, ahonnan $z \rightarrow x$ -szel a lokális kommutativitás feltétele adódik.

VII. A $w_{\mu}^k(z)$ kiterjesztés további tulajdonságai. Disztribúció értelemben

$$w_{\mu,p}^k(x)^* = w_{I\mu,p}^{-Ik}(x_n \dots x_0). \quad (7)$$

A jobb (bal) oldal folytatása $w_{I\mu,p}^{-Ik}(z_n \dots z_0) (w_{\mu,p}^k(z_0^* \dots z_n^*))^*$ analitikus $T_{pI}(T_p^*)$ -ban, de $T_{pI} = T_p^*$. Ezért az „ék szélére” vonatkozó tétel szerint a két folytatás egymással

megegyezik. Tovább folytatva a permutált csövek uniójába, nyerjük

$$w_\mu^k(z_0^* \dots z_n^*)^* = w_{I\mu}^{-Ik}(z_n \dots z_0). \quad (8)$$

((8) T_p^* -ban teljesül, de akkor az identitás tétel (1. Függelék) miatt az egyesítésben is). Ugyanígy látható be

$$w_\mu^k(z_0 \dots z_n) = w_{P\mu}^{Pk}(z_{P(0)} \dots z_{P(n)})\sigma(P, k): \quad (9)$$

(8) és (9)-ből

$$w_\mu^k(z^*)^* = w_\mu^{-k}(z)\sigma(I, k). \quad (10)$$

Ha $-k = k$ (valós tér)

$$w_\mu^k(z^*)^* = w_\mu^k(z)\sigma(I, k). \quad (11)$$

Ha $Pk = k$, $P\mu = \mu$, akkor

$$w_\mu^k(z) = w_\mu^k(z_{P(0)} \dots z_{P(n)})\sigma(P, k), \quad (12)$$

(pl. egy skalár térre).

A Lorentz-kovarianciát kifejező egyenlet is átvihető az unióba való kiterjesztésre,

$$w_\mu^k(z) = \sum_v S^k(A^{-1})_\mu^v w_v^k(Az + c), \quad A \in L_+^\uparrow(R), \quad (13)$$

ahol $Az + c = (Ax_j + a) + i(Ay_j + b)$, $z_j = x_j + iy_j$, $c = a + ib$. Ugyanis (13) fennáll kerületi értékekre, T_p -ből $z \rightarrow x$ -re; mindkét oldal z -ben holomorf $U\{T_p\}$ -ben (a T_p -k invariáns halmazok!), így az ék széle-tétel miatt (13) igaz. Fordítva, ha $w_\mu^k(z)$ holomorf és (13)-at teljesíti, akkor kerületi értéke is.

Ha (13)-ban $A = 1$, akkor a $w_\mu^k(z)$ függvényről látjuk, hogy a $\zeta_{j+1} = z_j - z_{j+1}$ változók holomorf függvénye.

Analóg tulajdonságai vannak $W_\mu^k()_p$ kiterjesztésének is.

3. §. Kiterjesztés a komplex Lorentz-transzformációk segítségével

A (13) transzformációs törvényből kiindulva Hall, Wightman és Bargman jutott először újabb analitikus kiterjesztésre [5]. Mindenekelőtt azonban a komplex Lorentz transzformációra szögezzünk le néhány alapvető megállapítást.

Komplex Lorentz csoporton értjük $\zeta = (\zeta^0, \dots, \zeta^3)$ komplex lineáris, a $\zeta^2 = (\zeta^0)^2 - \zeta^k \zeta^k$ -t invariánsul hagyó transzformációinak összességét. Jele $L(C)$. $L(C)$ -nek két komponense van $L(C) = L_+(C) + PL_+(C)$. $L_+(C)$ az összes olyan komplex A -t tartalmazza, melyekre $\det A = 1$. A másik komponensnél a determináns -1 . L és $L_+(C)$ -t analitikus parametrizációval a következőképpen láthatjuk el: Valós/komplex λ_k -ra a $A = (E + R)(E - R)^{-1}$ egy valós/komplex Lorentz transzformáció, feltéve a $|\lambda_k|$ -k elég kicsik és

$$R = \begin{pmatrix} 0 & \lambda_4 & \lambda_5 & \lambda_6 \\ \lambda_4 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_2 \\ \lambda_5 & -\lambda_3 & 0 & \lambda_1 \\ \lambda_6 & \lambda_2 & -\lambda_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Fordítva, ha A elég közel van az egységelemhez (E -hez), akkor $R = (A - E)(A + E)^{-1}$, ahol A valós/komplex Lorentz-transzformáció, (14) alakú és λ_k valós/komplex. Az állítás verifikálható.

A -t $\overset{\circ}{A}$ -lal ekvivalensnek hívjuk, ha $A = A_1 \overset{\circ}{A} A_2$ és $A_1, A_2 \in L_+^\uparrow(R)$. Jost mutatta meg [5, 6], hogy A mindig ekvivalens a következő normál alakok egyikével

$$M_1(\varphi, \chi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & i \sin \varphi & 0 & 0 \\ i \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \chi & i \sin \chi \\ 0 & 0 & -i \sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$M_2(\tau) = \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 & \tau & i\tau \\ 0 & 1 & \tau & i\tau \\ \tau & -\tau & 1 & 0 \\ i\tau & -i\tau & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

φ, χ, τ valós.

Most kimondjuk a Bargman—Hall—Wightman tételt; egyenlőre az előző §-tól független alakban; azután a tételt $w_{k,p}^\mu(z)$ -re alkalmazzuk.

Ha a $w_\mu(\zeta_1 \dots \zeta_n)$ függvények egyértékűek és holomorfok a $T_n = \{\zeta \mid \text{Im } \zeta_i \in V_+; j = 1, \dots, n\}$ csőben és minden $A \in L_+^\uparrow(R)$ -re

$$w_\mu(\zeta) = \sum_v S(A^{-1})_\mu^\nu w_\nu(A\zeta), \quad (16)$$

ahol $S(A)$ egy végesdimenziós és egyértékű ábrázolása $L_+^\uparrow(R)$ -nek (kétértékűre $w=0!$), akkor 1. $w_\mu(\zeta)$ egyértelműen és holomorf módon kiterjeszthető a kiterjesztett csőbe, azaz a $T'_n = \{A\zeta \mid \zeta \in T_n, A \in L_+(C)\}$ tartományba, 2. a kiterjesztés kielégíti (16)-ot, de $A \in L_+(C)$.

T'_n -t úgy kapjuk, hogy minden $A \in L_+(C)$ -vel képezzük a AT_n halmazok egyesítését. $S(A)A \in L_+(C)$ -re egyértelmű analitikus kiterjesztése a $A \in L_+^\uparrow(R)$ -hez tartozó $S(A)$ -nek, ugyanis $S(A), A \in L_+^\uparrow(R)$ A_{ik} polinomja, lévén, hogy $w_\mu(\zeta)$ valaképpen tenzor jellegű mennyiség — így kiterjeszthető.

A bizonyítás több részből áll.

1. $A \in L_+(C)$ és $\zeta \in T'_n$ -re definiáljuk (16) jobboldalával a

$$\sum_v S(A^{-1})_\mu^\nu w_\nu(A\zeta) \equiv W_\mu(\zeta) \quad (17)$$

függvényt, de $A\zeta$ mindig $\in T_n$ (erre definiált w_ν). W_μ $A\zeta$ -től és A -tól függ. Ha $A \in L_+(C)$ rögzített, akkor ζ egy részében változhat T'_n -nek, itt W_μ analitikus ζ -ban; ugyanis fix A -ra a baloldal $A\zeta \in T_n$ analitikus függvénye és $A\zeta$ ζ analitikus függvénye, de analitikus függvény analitikus függvénye maga is analitikus. Egy másik A -val T'_n másik részhalmazában ugyanez a helyzet.

2. A T'_n -be való kiterjesztés egyértelmű. Ha T_n két különböző ζ_1 és ζ_2 pontjából két különböző A_1 és A_2 -vel közös $\zeta \in T'_n$ -höz folytatunk, akkor a (17) definíció szerint ugyanazt a függvényt kaptuk. Az utóbbi feltétele (17)-ből

$$\sum_v S(A_1^{-1})_\mu^\nu w_\nu(\zeta_1) = \sum_v S(A_2^{-1})_\mu^\nu w_\nu(\zeta_2), \quad (18)$$

ahol a közös ζ : $\zeta = A_1^{-1}\zeta_1 = A_2^{-1}\zeta_2$; $A_{1,2} \in L_+(C)$; $\zeta_1, \zeta_2 \in T_n$. Másként

$$w_\mu(\zeta_1) = \sum_v S((A_2 A_1^{-1})^{-1})_\mu^\nu w_\nu(\zeta_2), \quad \zeta_2 = (A_2 A_1^{-1})\zeta_1, \quad (19)$$

ez éppen a (16) feltétel komplex A -ra. Alább majd megmutatjuk, hogy teljesül (4. pont).

3. (17) kielégíti a (16) tulajdonságot, hiszen $\zeta \in T'_n$ -re, $A, A_1 \in L_+(C)$ -re, de $A\zeta \in T_n$, fennáll

$$\begin{aligned} W_\mu(A_1\zeta) &= \sum_v S(A_1A^{-1})_\mu^\nu w_\nu(A\zeta) = \sum_v S(A_1)_\mu^\nu \left(\sum_\varrho S(A^{-1})_\nu^\varrho w_\varrho(A\zeta) \right) = \\ &= \sum_v S(A_1)_\mu^\nu W_\nu(\zeta). \end{aligned} \quad (20)$$

Az első egyenlőség (17)-ből következik, ha baloldalán $A \rightarrow AA_1^{-1}$, $\zeta \rightarrow A_1\zeta$.

4. Legnehezebb belátni azt, hogy (16) fennáll, ha $A \in L_+(C)$ és $\zeta, A\zeta \in T_n$. Utóbbi fixált ζ -ra egy D_A tartományt választ ki, ha tehát $A \in D_A$, akkor $\zeta \in T_n$ -re $A\zeta \in T_n$. Tekintsük (16) jobboldalát fix ζ -ra, mint egy $F_\zeta(A)$ függvényt. Ha $F_\zeta(A)$ konstans D_A -n, akkor (16) fennáll.

Először $F_\zeta(A)$ lokális értelemben való konstansságát látjuk be. Ha $\zeta \in T_n$, akkor az $E \in L_+(C)$ egységelem kis környezetében minden A olyan, hogy $A\zeta \in T_n$; egy N , E körüli részkörnyezetben viszont analitikus parametrizáció vezethető be (lásd fenn). $A \in N$ a $(\lambda_1 \dots \lambda_6)$ analitikus függvénye; λ_k a $\lambda_k = 0$ kis környezetébe esik. $A\zeta$ is analitikus (λ_k) -ban, így $A \in N \subset D_A$ -ban $F_\zeta(A)$ analitikus (λ_k) -ban. Mint-hogy N tartalmaz egy valós környéket (mely (λ_k) -ban egy valós környéknek felel meg) és ott $F_\zeta(A)$ állandó, az identitás tétel (1. Függelék) miatt $F_\zeta(A)$ N -ben is állandó.

Az előbbi argumentáció minden $A \in D_A$ kis környezetében megtehető, mint-hogy a AN halmazban ugyanaz a parametrizáció választható, mint N -ben. Így minden $A \in D_A$ kis környezetében $F_\zeta(A)$ állandó. Ha D_A összefüggő volna, akkor E és $A \in D_A$ közé végezzük átfordó „kör” lehetne elhelyezni, úgy, hogy az első /utolsó középpontja E/A . Ekkor $F_\zeta(A)$ az egész D_A -n állandó.

5. D_A összefüggő; azaz, ha $A \in D_A$, akkor van oly $A(t) \in D_A$ folytonos görbe $0 \leq t \leq 1$, mely $E = A(0)$ -t és $A = A(1)$ -et összeköti. Másszóval, ha $\zeta \in T_n$ és $A\zeta \in T_n$, akkor e két pont folytonos $A(t)\zeta \in T_n$ görbével köthető össze, $0 \leq t \leq 1$. Tudjuk azt, hogy $A \in L_+(C)$ a normálalakokkal állítható elő, $A = A_1 M_{1,2} A_2$. Elég azt belátni, hogy az M_1 és M_2 normálalakok összefüggő halmazt alkotnak. ((16) valós A -val teljesül.)

Pl. $M_2(\tau)$ esetén: legyen $n = 1$, $\zeta = \xi + i\eta$, $\eta \in V_+$, $\zeta(\tau) = \xi(\tau) + i\eta(\tau) = M_2(\tau)\zeta$. Innen

$$\begin{aligned} \eta^0(\tau) &= \eta^0 + \tau(\eta^2 + \xi^3), \\ (\eta(\tau))^2 &= (\eta)^2 + 2\tau(\xi^3(\eta^0 - \eta^1) - \eta^3(\xi^0 - \xi^1)) - \\ &\quad - \tau^2((\eta^0 - \eta^1)^2 + (\xi^0 - \xi^1)^2). \end{aligned} \quad (21)$$

Azok a τ értékek, melyekre $\zeta(\tau) \in T_1$ egy $\tau=0$ -t tartalmazó intervallumot alkotnak. Ha $n > 1$, akkor az egyes ζ_k -ból adódó τ -intervallumok közös részét kell venni.

Hasonlóan, ha ζ és $A\zeta \in T_n$ és A M_1 alakú, akkor $A(t) = M_1(t\varphi, t\chi)$ -t képezve, $A(t)\zeta \in T_n$. Nem verifikáljuk.

Alkalmazzuk a fenti tételt az előző § függvényeire. $W_\mu^k(\cdot)_p T_{p,n}$ -ből egyértelmű, holomorf módon terjeszthető ki a $T'_{p,n} = \{A\zeta | \zeta \in T_{p,n}, A \in L_+(C)\}$ kiterjesztett

csőbe. Egyúttal $w_{\mu,p}^k(z)$ is kiterjesztődik T_p -ből egyértelműen és holomorf módon a

$$T'_p = \{Az | (A(z_{p(i)} - z_{p(i+1)})) \in T'_{p,n}\}$$

kiterjesztett permutált csőbe. Láthatóan $T'_p = \{Az | z \in T_p, A \in L_+(C)\}$.

Megmutatható, hogy ha (16) $A \in L^+(R)$ -re teljesül, nem jutunk T'_n -nél nagyobb analiticitási tartományhoz.

Hall és Wightman idézett dolgozatukban még a következő tételt is bebizonyították: Legyen az $f(z)$ n komplex négyesvektor változós komplex függvény analitikus a

$$T_n = \{z = (z_j) = (\xi_j - i\eta_j) | \eta_j \in V_+; j = 1, \dots, n\}$$

csőben és invariáns $L^+(R)$ -rel szemben, $f(z) = f(Az)$. Ekkor f a (z_j, z_k) skalárszorzatok függvénye és analitikus abban a komplex tartományban, amelyben a skalárszorzatok változnak, amikor z T_n -ben fut.

4. §. Jost-pontok

Az előző §-ban előforduló T_n , T_p , $T_{p,n}$ csövekben valós pontok nem találhatók. A kiterjesztett csövek (T'_n , $T'_{p,n}$, T'_p) azonban szerkezetüknél fogva tartalmaznak valós (regularitási) helyeket, más néven Jost pontokat. Vizsgáljuk meg pl. a T'_n valós pontjait. Ha $n=1$, akkor könnyű látni, hogy $\zeta \in T'_1$, valósságából következően térszerű vektor. Jost ezzel kapcsolatban megmutatta [5], hogy a (q_1, \dots, q_n) valós pontok akkor és csakis akkor esnek T'_n -be, ha q_1, \dots, q_n konvex burka csak térszerű vektorokat tartalmaz, vagyis a $\sum_{i=1}^n \lambda_i q_i$ ($\lambda_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i > 0$) alakú vektorokra $(\sum_{i=1}^n \lambda_i q_i)^2 < 0$ minden λ_i választásra.

A feltétel szükséges. Legyen $(q_1, \dots, q_n) \in T'_n$ és valós, akkor van olyan $A \in L_+(C)$ és $\zeta = \xi - i\eta$, $\eta \in V_+$, hogy $(q_i) = (A\zeta_i)$. $\lambda_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$ -re vizsgáljuk $\sum_{i=1}^n \lambda_i q_i$ -t

$$\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i q_i\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \zeta_i\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \xi_i\right)^2 - \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \eta_i\right)^2 - 2i \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \xi_i \eta_i\right). \quad (22)$$

$$\cdot \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \eta_i\right) = \text{valós.}$$

Így $\sum_{i=1}^n \lambda_i \xi_i$ és $\sum_{i=1}^n \lambda_i \eta_i$ ortogonális vektorok. De $\eta_i \in V_+$ és V_+ konvex, ezért $\sum_{i=1}^n \lambda_i \eta_i$ időszerű. Tehát $\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \xi_i\right)^2 < 0$, (22) negatív.

Az elegendőség azt jelenti, hogy ha (q_1, \dots, q_n) valamilyen valós pont és $\lambda_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i > 0$ -ra $\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i q_i\right)^2 < 0$, akkor (q_i) Jost-pont. Tekintsük a q_1, \dots, q_n négyesvektorok által kifeszített konvex térszerű K kúpot. $K \cap V_+ = K \cap V_- = 0$. A V_+ és K ill. V_- és K konvex halmazokat egy (α) ill. (β) síkkal teljesen el lehet választani.

tani. (α) a V_+ ill. (β) a V_- érintő síkjá. (α) ill. (β) egyenlete: $\alpha\zeta \equiv \alpha_\mu \zeta^\mu = 0$ ill. $\beta\zeta \equiv \beta_\mu \zeta^\mu = 0$, ahol $\alpha^2 = \beta^2 = 0$, $\alpha\beta < 0$ és ζ^μ az illesztősíkban van. Ha $\zeta \in V_+$ ill. K vagy V_- , akkor $\alpha\zeta > 0$ ill. $\alpha\zeta < 0$. Hasonlóan, ha $\zeta \in V_-$ ill. K vagy V_+ , akkor $\beta\zeta > 0$ ill. $\beta\zeta < 0$. Normáljuk α, β -t $\alpha\beta = -2$ -vel és válasszunk speciális koordinátarendszert: $\alpha = (1, 1, 0, 0)$, $\beta = (-1, 1, 0, 0)$. Ekkor bármely $\zeta \in K$ -ra $\zeta^0 - \zeta^1 < 0$, $-\zeta^0 - \zeta^1 < 0$, azaz $\zeta^1 > |\zeta^0|$. Tehát $q_i^1 > |q_i^0|$. Hajtsuk végre a

$$(Aq) = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_h^0 \\ q_h^1 \\ q_h^2 \\ q_h^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -iq_h^1 \\ -iq_h^0 \\ -q_h^2 \\ -q_h^3 \end{pmatrix} \quad (23)$$

komplex Lorentz-transzformációt, akkor $-\text{Im}(Aq) \in V_+$, tehát $(Aq) \in T_n$, ahonnan $(q_i) \in T'_n$.

Ezzel a valós analiticitási pontokat T'_n -ben áttekintettük. Megjegyezzük, hogy nincs kizárva a T'_n -n kívülre való analitikus folytathatóság, azonban valós regularitási helyek T'_n -n kívülre nem eshetnek. Egy valós pont akkor és csakis akkor esik $T'_{p,n}$ -be, ha

$$\left(\sum_1^n \lambda_i (A\zeta)_i \right)^2 < 0, \lambda_i \geq 0, \sum_1^n \lambda_i > 0, \quad (24)$$

$$\zeta_i = z_{P(i)} - z_{P(i+1)}, \quad A\zeta \in T'_{p,n}.$$

Egy Az valós pont akkor és csakis akkor esik T'_p -be, ha

$$\left(\sum_1^n \lambda_i (z_{P(i)} - z_{P(i+1)}) \right)^2 < 0, \lambda_i \geq 0, \sum_1^n \lambda_i > 0, \quad z \in T_p. \quad (25)$$

(25) (24)-ből következik. Tehát T'_p Jost pontjai teljesen térszerűek, azaz akármelyik komponens akármelyiktől, (25) következtében térszerűen van elválasztva.

Végezetül foglalkozzunk a permutált kiterjesztett csövek egyesítésébe való analitikus kiterjesztéssel. Első feladatunk a permutált kiterjesztett csövek kapcsolatát megvizsgálni. Legyen a $T'_n = \{\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_n) = A^{-1}\zeta' \mid \zeta' \in T_n\}$ cső permutáltja $P_{(j,j+1)}T'_n$, $P_{(j,j+1)}T'_n = \{\hat{\zeta} = A^{-1}\hat{\zeta}' \mid \hat{\zeta}' \in P_{(j,j+1)}T_n\}$. T_n -ből $P_{(j,j+1)}T_n$ -be a

$$\begin{aligned} \zeta'_h \rightarrow \hat{\zeta}'_h &= \zeta'_h & h \neq j-1, j, j+1 \\ \zeta'_{j-1} \rightarrow \hat{\zeta}'_{j-1} &= \zeta'_{j-1} + \zeta'_j \\ \zeta'_j \rightarrow \hat{\zeta}'_j &= -\zeta'_j \\ \zeta'_{j+1} \rightarrow \hat{\zeta}'_{j+1} &= \zeta'_{j+1} + \zeta'_j \end{aligned} \quad (26)$$

transzformációval jutunk el. $\hat{\zeta}$ és ζ is (26)-tal vannak összekötve. A (26) transzformáció hátterét jól látni, ha ζ' -t $\zeta' = (z_0 - z_1, \dots, z_{j-1} - z_j, z_j - z_{j+1}, z_{j+1} - z_{j+2}, \dots)$ alakba írjuk és a $z_j \leftrightarrow z_{j+1}$ cserét hajtjuk végre. T_p és T'_p ill. a kiterjesztett csövek közt ugyancsak (26) kapcsolat áll fenn.

A $T'_n \cap P_{(j,j+1)} T'_n$ -ben van egy valós környék (1. Függelék értelmében). Tekintsük ugyanis a

$$\zeta: \begin{cases} \zeta_h = (0, b, 0, 0) & h \neq j-1, j, j+1 \\ \zeta_{j-1} = (a, b, 0, 0) \\ \zeta_j = (0, 0, \varepsilon, 0) & 0 < |a| < b \\ \zeta_{j+1} = (-a, b, 0, 0) \end{cases} \quad (27)$$

valós pontot. Egyszerűen látható, hogy ζ Jost pont T'_n -ben. De ζ a $P_{(j,j+1)} T'_n$ -nek is pontja, minthogy a

$$(\zeta_1, \dots, \zeta_{j-2}, \zeta_{j-1} + \zeta_j, -\zeta_j, \zeta_j + \zeta_{j+1}, \zeta_{j+2}, \dots, \zeta_n)$$

pontból (26) alapján adódik és utóbbi pont T'_n -ben Jost pont:

$$(\sum \lambda_h \zeta_h + \lambda_{j-1}(\zeta_{j-1} + \zeta_j) - \lambda_j \zeta_j + \lambda_{j+1}(\zeta_j + \zeta_{j+1}))^2 < 0. \quad (28)$$

Másrészt ζ kis valós környezete is a két cső közös részébe eső Jost pontokból áll. Ugyanez a tulajdonsága van meg T'_p és $T'_{p'}$ közös részének is.

Tudjuk, hogy $w_{\mu,p}^k(z)$ ill. $w_{\mu,p'}^k(z)$ analitikusan folytatható T'_p ill. $T'_{p'}$ -be. A (17) definíció következtében a folytatások $T'_p \cap T'_{p'}$ Jost pontjaiban megegyeznek. (Ha $z' = \Lambda z \in T_p$, $z \in T'_p$ valós, akkor z' valós része térszerű.) Így az „edge of wedge” tétel miatt $T'_p \cup T'_{p'}$ -ban közös analitikus folytatás létezik. Ily módon $w_{\mu,p}^k(z)$ kiterjeszthető az összes T'_p egyesítésébe is. Tomozawa mutatta meg, hogy a kiterjesztett csövek uniójába való kiterjesztés egyértelmű [7].

Könnyű látni, hogy ha egy függvény analitikus $\bigcup_p \{T'_p\}$ -ben és az előző §-okban megfogalmazott tulajdonságokat is kielégíti, (III., (20)), akkor kerületi értéke, mint mérsékelt disztribúció a Lorentz kovarianciát, a Wightman-függvények tartó tulajdonságát, és a lokális kommutativitás feltételét is kielégíti. A kiterjesztett csövekben analitikus függvényekből tehát eljuthatunk a Wightman függvényekhez. Másrészt a T'_p -beli w -függvényeket elég megadni T'_p egy valós környékén, a komplex függvénytan szerint ebből már az egész T'_p -ben is egyértelműen előállítható w . Mármost a Jost pontok valós környéket képeznek. Ezért jelentősek számunkra.

Ugyanis a Jost pontok imaginárius része 0, a valós rész pedig egy nyílt halmazban változik, hiszen ha ε_i kis szám, $|\varepsilon_i| < 1$, akkor (ϱ_i) -vel $(\varrho_i(1 + \varepsilon_i))$ is Jost pont. Verifikálható, hogy a Jost pontok összefüggő halmazt alkotnak.

Ha $n \leq 3$, akkor a fenténél még erősebb állítás igaz. $n \leq 3$ -ra már a közös időkomponenssel rendelkező valós (x_0, \dots, x_n) pontok is valós környéket képeznek T'_n -ben, így elég itt megadni $W(x_0)$, $W(x_0 x_1)$, $W(x_0 x_1 x_2)$, $W(x_0, \dots, x_3)$ -at, hogy az egész kiterjesztett csőben megszabjuk azokat.

A most ismertetett analitikus kiterjesztések segítségével bizonyította Tomozawa 1963-ban a lokális kommutativitás globális természetéről szóló tételt [8]. Ha az $A_\alpha(x)$, $B_\beta(y)$ tenzor vagy spinor operátorokra teljesülnek az axiómák, de a lokális kommutativitás helyett $[A_\alpha(x), B_\beta(y)]_\pm = 0$ a térszerű $(x-y)$ pontok összességének egy részhalmazában, akkor az előbbi egyenlet akármelyik $(x-y)$ térszerű távolságra is igaz. Tehát, pl. a távoli, térszerűen fekvő pontokra megkövetelt lokális kommutativitás közeli térszerűen elválasztott pontokra is igaz.

További alkalmazásokat a következő részben tárgyalunk.

1. Függelék

Többváltozós holomorf függvények [9]

Jelöljük C^n -nel az n -dimenziós komplex euklidesi teret. A $(w_1, \dots, w_n) \in C^n$ pont egy környezetében definiált f komplex értékű függvényt $w = (w_1, \dots, w_n)$ -ben holomorfnek nevezzük, ha van egy

$$\sum_{k_1, \dots, k_n=0}^{\infty} c_{k_1 \dots k_n} (z_1 - w_1)^{k_1} \dots (z_n - w_n)^{k_n} \quad (1)$$

hatványsor, mely w valamilyen környezetében f -hez konvergál. w környezetén értjük a $|z_i - w_i| < R_i$ ($i=1, \dots, n$) feltételekkel definiált ponthalmazt.

Belátható, hogy ha (1) konvergál z -nél, akkor minden olyan ζ -ra, melyre $|\zeta_j - w_j| \leq |z_j - w_j| - \varepsilon$ ($j=1, \dots, n$), abszolút és egyenletesen konvergens. A c együttthatók f deriváltjaival azonosak.

A holomorfitás eldöntésében Hartog-tételét használhatjuk: ha $f(z)$ minden z_i változóban holomorf, akkor az összes változóban (1) értelemben is holomorf és viszont.

C^n tartományain (D) fogjuk érteni a C^n -ben található nyílt összefüggő halmazokat. Egy halmaz nyílt, ha akármelyik pontja körül van egy, a halmazba eső környezet a fenti értelemben; és összefüggő, ha bármely két pontját a halmazban futó $z(t)$, $0 \leq t \leq 1$ folytonos görbével összeköthetjük.

Többször használjuk az identitás tételt: ha az f_1 és f_2 holomorf $D \subset C^n$ -ben és D valamelyik pontjának egy környezetében $f_1 = f_2$, akkor a teljes D -n $f_1 = f_2$. E tétel élesebb formában is kimondható.

C^n -ben egy valós környéken értjük azon z pontok halmazát, melyre $\text{Im } z_1, \dots, \text{Im } z_n$ minden pontra ugyanaz és a $\text{Re } z_1, \dots, \text{Re } z_n$ -ek halmaza R^n egy nyílt halmaza.

Az identitás tétel fennáll, ha $f_1 = f_2$ -t csak D egy valós környékén követeljük meg.

2. Függelék

Konvolúció; O'_c és O_M terek [10]

Ha $f, g \in \mathcal{S}$, akkor konvolúciójukon értjük az

$$(f * g)(x) = \int f(x - \xi) g(\xi) d\xi \quad (1)$$

függvényt, $f * g \in \mathcal{S}$. A konvolúciót kiterjeszthetjük, g helyett disztribúcióra is. Ha $f \in \mathcal{S}$, $S \in \mathcal{S}'$, akkor $S * f$ jelentse $(S * f)(x) = (S(y), f(x - y))$ és

$$(S * f)(h) = (S, \check{f} * h) \quad \check{f}(x) = f(-x) \quad h \in S. \quad (2)$$

$(S * f)(x)$ -et az S regularizációjának hívjuk.

Legyen $S \in \mathcal{S}'$, $f \in \mathcal{S}$ és azt akarjuk, hogy $(S(y), f(x + y)) \in \mathcal{S}$ legyen. A megfelelő S -eket az $O'_c \subset \mathcal{S}'$ térben levőknek mondjuk. Pl. $1 \in \mathcal{S}'$, de $1 \notin O'_c$. $\exp(i\pi x^2) \in O'_c$ de nem eleme \mathcal{S} -nek. Így az összes \mathcal{S} -elem disztribúcióként O'_c -ben van.

Legyen $S, T \in \mathcal{S}^*$, $f \in \mathcal{S}$. $S * T$ -n értjük az

$$(S * T, f) = (T(x), (S(y), f(x+y))) \quad (3)$$

disztribúciót. Ha $(S(y), f(x+y)) \in \mathcal{S}$ azaz $S \in O'_c$, akkor $S * T \in \mathcal{S}^*$. Az $S \in O'_c$ az $S * f \in \mathcal{S}$ -sel ekvivalens, $S \in \mathcal{S}^*$, $f \in \mathcal{S}$. $S * f$ egy akárhányszor deriválható függvény.

Legyen $T \in \mathcal{S}^*$, milyen f függvényekre lesz $fT \in \mathcal{S}^*$?

Világos, hogy ha $\varphi \in \mathcal{S}$, akkor a feltétel $f\varphi \in \mathcal{S}$. Az ilyen f -ek egy O_M függvényosztályt képeznek. Nyilván $\mathcal{S} \subset O_M$. Pl. $1 \in O_M$, $1 \notin \mathcal{S}$. Fennáll: ha $f \in O_M$, akkor

$$|f(x)| \leq M_i(1+x^2)^i. \text{ Ha } fT \in \mathcal{S}^*, \text{ akkor a deriváltja is, innen } \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)T \in \mathcal{S}^*. \text{ Tehát}$$

ha $f \in O_M$, akkor $|D^p f(x)| \leq |P_p(x)|$, P -vel x egy polinomját jelöltük.

Ha $f \in \mathcal{S}$, $S \in \mathcal{S}^*$, akkor $S * f \in O_M$. Ez $S \in O'_c$ -re triviális, azonban általánosan is belátható, hogy $S * f$ polinommal majorálható. (Pl. S szerkezetéből.)

Ha $f \in \mathcal{S}$, $T \in \mathcal{S}^* \Rightarrow fT \in O'_c$ (O'_c definíciójából).

A Fourier transzformáció a konvolúciót szorzatba viszi, \mathcal{F} az O'_c minden elemét egy O_M -beli függvénybe viszi. Ugyanis

$$\begin{aligned} [\mathcal{F}(S * f)](h) &= (S * f)(\mathcal{F}h) = (S, \check{f} * \mathcal{F}h) = \\ &= (S, \mathcal{F}[(\mathcal{F}f)h]) = (\mathcal{F}S, (\mathcal{F}f)h) = \\ &= (\mathcal{F}f)(\mathcal{F}S, h), & f, h \in \mathcal{S} \\ \mathcal{F}(S * f) &= (\mathcal{F}f) \cdot (\mathcal{F}S). & S \in \mathcal{S}^* \end{aligned} \quad (4)$$

A jobboldal O'_c -ben van, Fourier transzmáltja, $S * f \in O_M$.

Ha $f \in \mathcal{S}$, $T \in \mathcal{S}^*$, akkor $\mathcal{F}(fT) = (\mathcal{F}f) * (\mathcal{F}T)$.

3. Függelék

Mérsékelt disztribúciók Laplace-transzmáltja

A következőkben $\mathcal{F}f(x)$ -en $\int \exp(-ixy)f(y)dy$ -t értjük ($2\pi x \rightarrow x!$).

Tekintsük azt a T disztribúciót, amelyre $e^{-\xi x}T \in \mathcal{S}^*$. Ez néhány $\xi \in R^n$ -re előfordulhat. Pl. ha $n=1$ és

$$T = \begin{cases} e^{-x} & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}, \quad (1)$$

akkor a megengedett ξ -k $1+\xi \geq 0$ -t elégítik ki. Pl. $T=1 \in \mathcal{S}^*$ -ra nincs ξ , de $T=1 \in \mathcal{D}^*$ -ra igen. ($\mathcal{S}^* \subset \mathcal{D}^*$)

Tétel: Legyen $T \in \mathcal{D}^*$ és Γ_T azon ξ -k halmaza, melyekre $e^{-\xi x}T \in \mathcal{S}^*$. Γ_T konvex halmaz. Ugyanis, ha $\xi^0, \xi^1 \in \Gamma_T$, akkor minden $\xi = t\xi^0 + (1-t)\xi^1$, $0 < t < 1$, gyel képzett $e^{-\xi x}T$ is $\in \mathcal{S}^*$. Ez világos, minthogy az

$$a(x, \xi) = e^{-x\xi} / e^{-x\xi^0} + e^{-x\xi^1} \quad (2)$$

függvény O_M -ben van és az

$$e^{-x\xi}T = a(x, \xi)e^{-x\xi^0}T + a(x, \xi)e^{-x\xi^1}T \quad (3)$$

jobboldala \mathcal{S}^* -ban van.

Jelöljük Γ_T belsejét Γ_T^0 -al. Γ_T^0 egy konvex nyílt halmaz. Az előbbi bizonyításhoz hasonlóan látható be, hogy ha ξ a Γ_T^0 tetszés szerinti K kompakt részhalmazában van, $e^{-\xi x}T \in O'_c$, sőt a $\xi \rightarrow e^{-\xi x}T$ függvény akárhányszor deriválható ξ szerint.

A $T \in \mathcal{D}^*$ disztribúció Laplace transzformáltján értjük az

$$\mathcal{L}(T) = \mathcal{F}(e^{-\xi x}T), \quad \xi \in \Gamma_T \quad (4)$$

disztribúciót. $\mathcal{L}(T) \in \mathcal{S}^*$. Ha T egy függvény, akkor

$$(\mathcal{L}(T)(\eta), f(\eta)) = \int f(\eta) d\eta \int T(x) e^{-x(\xi + i\eta)} dx. \quad (5)$$

Az előzőkből láthatóan, ha $\xi \in K \subset \Gamma_T^0$, akkor $\mathcal{L}(T) \in O_M$, vagyis $\mathcal{L}(T) = G(\xi, \eta)$ az η -ban akárhányszor deriválható és

$$|\mathcal{L}(T)(\xi + i\eta)| \leq P_k(\eta). \quad (6)$$

A $P_k(\eta)$ polinom K -val változik. G a ξ szerint is akárhányszor deriválható.

Jelöljön Γ egy konvex nyílt halmazt R^n -ben, és jelölje $\mathcal{S}^*(\Gamma)$ azoknak a T disztribúcióknak a terét, melyekre $e^{-\xi x}T \in \mathcal{S}^*$ minden $\xi \in \Gamma$ -ra. Ha $T \in \mathcal{S}^*(\Gamma)$, akkor $e^{-\xi x}T \in O'_c$. $\mathcal{L}(T)$ -t (4)-gyel értelmezzük.

Tétel: Ha $T \in \mathcal{S}^*(\Gamma)$, akkor $\mathcal{L}(T)$ a $p = (p_j) = (\xi_j + i\eta_j)$ változó holomorf függvénye a $\Gamma + iR^n$ csőben és ha ξ kompakt részhalmazban változik, akkor (6) áll fenn.

Csak a holomorfitást kell belátni. Ez $\mathcal{L}(T)$ p -beli folytonosságból és p_j -ben fennálló holomorfitásából következik. Az utóbbi azért igaz, mert

$$\frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathcal{L} = (T(k), -k e^{-k(\xi + i\eta)}) = -i \frac{\partial}{\partial \eta_j} \mathcal{L}. \quad (7)$$

Nem nehéz látni a fordított tételt sem: Ha $F(p)$ holomorf a $\Gamma + iR^n$ csőben és minden $K \subset \Gamma$ kompakt részhalmazra kielégíti (6)-ot, akkor létezik egy $T \in \mathcal{D}^*$ disztribúció úgy, hogy $e^{-\xi x}T \in \mathcal{S}^*$ minden $\xi \in \Gamma$ -ra és $\mathcal{L}(T) = F(p)$.

Még az alábbi tételeket használtuk ki [11]:

1. Tegyük fel $T \in \mathcal{D}^*$, $\xi \in \Gamma$, $e^{-\xi p}T(p) \in \mathcal{S}^*$. Ha T tartója az $ap > A$ feltételben van, akkor Γ az összes $\xi + ta$ típusú pontot tartalmazza, $\xi \in \Gamma$, $t \geq 0$.

2. Az előbbi jelölések mellett legyen $\xi p \equiv \sum_{j=1}^n \xi_{j\mu} p_j^\mu$ és Γ a $\xi_j \in V_+$ kúp ($j = 1, \dots, n$). Tegyük fel, T tartója a \bar{V}_+ , akkor minden $\xi \in \Gamma$ -ra van oly P_ξ polinom, hogy

$$|\mathcal{L}(T)(\xi + a + i\eta)| \leq |P_\xi(a + i\eta)| \quad (8)$$

minden $\xi, a \in \Gamma$ -ra. Megfordítva, ha F holomorf a $\Gamma + iR^n$ csőben ($\Gamma a V_+$ kúp) és minden $\xi \in \Gamma$ -ra kielégíti (8)-at, akkor F egy Γ -ban levő tartójú disztribúció Laplace transzformáltja.

3. Ha $T \in \mathcal{S}^*$ és $\mathcal{L}(T)$ minden $\xi \in \Gamma$ -ra létezik akkor

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \int \mathcal{L}(T)(\xi + i\eta) f(\eta) d\eta = (\mathcal{F}T, f). \quad (9)$$

Megfordítva, ha $\mathcal{L}(T)$ konvergál $V_+ \ni \xi \rightarrow 0$ -ra $\mathcal{S}^*(\eta)$ -ban, akkor $\mathcal{L}(T)$ egy mér-sékelt disztribúció Laplace-transzformáltja.

4. Legyen T , $e^{-p\xi}T \in \mathcal{S}^*$ $\xi \in \Gamma$ -ra ($\xi_j \in V_+$). Akkor Γ minden K kompakt rész-halmazához van oly $P_k(\eta)$ polinom és r egész, hogy

$$|\mathcal{L}(T)(t\xi + i\eta)| \leq \frac{P_k(\eta)}{t^r} \quad 0 < t < 1 \quad (10)$$

minden η -ra és $\xi \in K$ -ra. Megfordítva, ha F holomorf a $\Gamma + iR^n$ csőben és kielégíti (10)-et, akkor $F = \mathcal{L}(T)$ és $T \in \mathcal{S}^*$.

4. Függelék

Az „ék széle”-tétel

Eredetileg Painlevé bizonyította egy komplex változóra és folytonos kerületi értékekre. A diszperziós relációk kapcsán Bremmermann, Oehme és Taylor, majd pedig Dyson mondta ki igen általános formában [12]. Nem ellentétes kúpokra Epstein bizonyította [13].

E tételnek a diszperziós relációk elméletében az a jelentősége, hogy kissé szélesebb holomorfitási tartományt enged meg a szokásosnál.

Painlevé tétele: Tegyük fel 1. $f_1(f_2)$ a felső (alsó) félsík egy nyílt D_1 (D_2) tartományában holomorf, 2. D_1 és D_2 kerülete tartalmazza az $a < x < b$ intervallumot, 3. $f_1(x + iy)$ ($f_2(x - iy)$) határértéke $f_1(x)$ ($f_2(x)$), $a < x < b$ -re folytonosan létezik és 4. $f_1(x) = f_2(x)$ $a < x < b$ -re. Ekkor $f_1(x)$ és $f_2(x)$ $a < x < b$ -n holomorf; és ugyanaz a holomorf függvény.

Painlevé tétele többváltozós komplex függvényekre is átvihető, sőt disztribúció kerületi értékekre is megfogalmazható.

Jelölje $R_n(\bar{R}_n)$ az előre (hátra) csövet. $\zeta \in R_n(\bar{R}_n)$, ha $\text{Im} \zeta_j \in V_+(V_-)$; $j = 1, \dots, n$. Tétel: Legyen $F(\zeta)$ ill. $G(\zeta)$ analitikus R_n ill. \bar{R}_n -ban. Valós ξ -re disztribúcióként létezzen

$$\lim_{R_n \ni \zeta \rightarrow \xi} F(\zeta) = F(\xi) \quad (1)$$

$$\lim_{\bar{R}_n \ni \zeta \rightarrow \xi} G(\zeta) = \bar{G}(\xi)$$

és $\xi = 0$ $\sum_{j=1}^n |\xi_{j\mu}| < a$ ($j = 1, \dots, n$) nagyságú valós környezetében legyen $F(\xi) = \bar{G}(\xi)$.

Ekkor $F(\zeta)$ és $G(\zeta)$ egyetlen analitikus $H(\zeta)$ függvény, mely analitikus $\xi = 0$ komplex $\sum_{j=1}^n |\xi_{j\mu}| < \frac{1}{2}a$ ($j = 1, \dots, n$) környezetében, valamint R_n és \bar{R}_n -ban. R_n -ben $H = F$, \bar{R}_n -ban $H = G$.

Ezt a tételt Epstein nem ellentétes kúp konfigurációkra is bebizonyította. Esetében a közös függvény holomorf az origó egy komplex környezetének és az egyesített kúpok konvex lezárásának közös részében.

IRODALOM

- [1] *O. Steinmann*, *Helv. Phys. Acta* 33, 257, 1960; 33, 347, 1960
H. Araki, *Journal of Math. Phys.* 2, 163, 1961.
- [2] *G. Källen—A. S. Wightman*, *Kgl. Danske Videnskab Selskab, Mat.-fys. Skrift* 1. No 6. 1958. *R. F. Streater*, *Proc. Roy. Soc. A.* 256, 39, 1960. *Nuovo Cimento*, 15, 937, 1960 *Journal of Math. Phys.* 1, 231, 1960.
- [3] *K. Symanzik*, *Lectures in Theoretical Physics III*, New York 1961, előadás a Coloradó Egyetemen 1960 nyarán.
- [4] *Pócsik György*, *Magyar Fizikai Folyóirat*, 13, 419, 1965; 13, 431, 1965
- [5] *D. Hall—A. S. Wightman*, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-fys Medd.*, 31, No 5. 1957 *R. Jost*, előadás, *Lectures on Field Theory and the Many-Body Problem*, New York, 1961.
- [6] *R. Jost*, *Helv. Phys. Acta*, 33, 773, 1960.
- [7] *Y. Tomozawa*, *Journal of Math. Phys.* 4, 1240, 1963.
- [8] *Y. Tomozawa*, *Nuovo Cimento*, 27, 543, 1963.
- [9] *A. S. Wightman*: „Analytic functions of several complex variables” in *Relations de dispersion et particules elementaires*, Hermann, Paris, 1960.
- [10] *L. Garding—J. L. Lions*, *Nuovo Cimento Suppl.* 14, 9, 1959.
- [11] *R. F. Streater—A. S. Wightman*: *PTC Spin and Statistics, and All That*, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1964.
- [12] *H. J. Bremmermann—R. Oehme—J. G. Taylor*, *Phys. Rev.* 109, 2178, 1958. *F. J. Dyson*, *Phys. Rev.* 110, 579, 1958.
- [13] *H. Epstein*, *Journal of Math. Phys.* 1, 524, 1960.

DISZLOKÁCIÓK KONTINUUM ELMÉLETE III.*

STACIONÁRIUS DISZLOKÁCIÓK

KOVÁCS ISTVÁN és CHATEL PÉTER

ELTE, Kísérleti Fizikai Tanszék

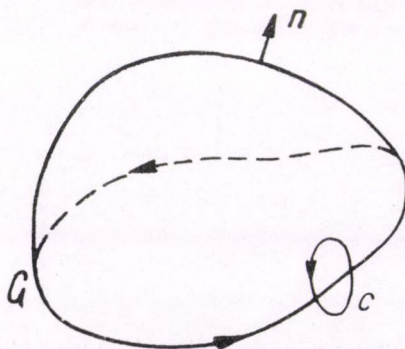
1. Bevezetés

Cikksorozatunk I. részében [1] kvalitatív képet adtunk a kristályos anyagok képlékeny viselkedéséért felelős diszlokációk geometriai és mechanikai tulajdonságairól. Az I. rész 4. §-ában olyan modellt írtunk le, amely rugalmas kontinuumban is értelmezhetővé teszi a diszlokáció fogalmát. Ahhoz, hogy e modell alapján eljuthassunk a diszlokációk matematikai leírásához, a rugalmas kontinuum alapegyenleteit kell erre az esetre megoldanunk. A II. részben [2] az ehhez szükséges ismereteket foglaltuk össze, és az 5. §-ban megadtuk a rugalmas, izotróp kontinuum alapegyenleteinek általános megoldását.

Jelen dolgozatban az említett eredményeket alkalmazzuk az I. részben leírt modellre, és levezetünk néhány általános formulát a diszlokációk elmozdulás- és feszültségterére, valamint energiájára vonatkozóan. Meghatározzuk diszlokáció hurkok vonalmenti feszültségét, amelynek értelmezéséhez az irodalomban eddig nem ismert úton jutunk el. Végül a kapott általános eredmények néhány alkalmazását mutatjuk be.

2. Diszlokációk elmozdulás- és feszültségtére

Az I. rész 4. §-ában adott definíció alapján tetszőleges zárt görbe mentén előállíthatunk diszlokációt oly módon, hogy az anyagot felvágjuk valamely kiszemelt görbe által határolt felület mentén, és a felület negatív normálisú oldalát b -vel (a Burgers-vektorral) elmozdítjuk a pozitív normálisúhoz képest. (A felület normálisát úgy definiáljuk, hogy a görbe körüljárása a normális irányából nézve pozitív legyen, ld. 1. ábra). Miután az így keletkezett üreget kitöltöttük, ill. átfedéseket megszüntettük, az anyagot a vágási felület mentén újra összehegesztjük. Ezen utolsó művelet után a diszlokációt — a vonal közvetlen környezetét kivéve — mindenütt „jó anyag” veszi körül, ezért azt várjuk, hogy az ily módon létrehozott diszlokáció tulajdonságai függetlenek a vágási felület választásától. A következőkben ezt a sejtést matematikai úton igazolni fogjuk: levezetjük az ún. Burgers-formulát [3] (2.1 §)



1. ábra: Zárt görbe mentén fekvő diszlokáció létrehozása

* Érkezett 1965. V. 14.

és a Peach—Koehler-formulát [4] (2.2 §). Az előbbi a diszlokáció körül kialakuló elmozdulásokat, az utóbbi pedig a feszültségeket adja meg a diszlokáció-vonalra vett vonalmenti integrálok formájában. Ezek a vonalintegrálok nem tartalmazznak a vágási felületre vonatkozó paramétereket, ezért valóban igazolják, hogy a diszlokációk tulajdonságai csak a Burgers-vektortól és a görbe alakjától függenek.

2.1. A Burgers-formula

Térfogati erők hatásától mentes, S felületekkel határolt rugalmas kontinuum elmozdulásterét a II. (46) formula írja le:

$$u_j(\vec{r}) = \oint_S [\sigma_{mk}(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}') + u_i(\vec{r}') C_{iklm} U_{jm,l}(\vec{r} - \vec{r}')] dS'_k. \quad (1)$$

Itt az r' pont bejárja az összes zárt felületet, amelyek a testet határolják, vagyis a test külső határfelületét és a testben esetleg jelenlevő üregek felületét. $\sigma_{mk}(\vec{r}')$ az ezen felületeken alkalmazott külső feszültségeket, $u_i(\vec{r}')$ pedig a felületeken a külső kényszer által előidézett elmozdulásokat adja meg. $U_{jm}(\vec{r})$ a rugalmas kontinuum alapegyenleteinek Green-függvény tenzora, amely a II. (41) egyenletnek tesz eleget.

Az (1) képlet segítségével meghatározzuk végtelen rugalmas közegbe ágyazott zárt diszlokáció-hurok elmozdulásterét. Mivel a képlet csak olyan tartományokat ír le, amelyekben az elmozdulás folytonos és egyértékű függvénye a helynek, ki kell rekesztenünk az S vágási felületet egy S_0 zárt felülettel. Határesetben ez a zárt felület mindkét oldalról végtelen pontosan megközelítheti az S vágási felületet, és az S_0 felületre vett integrál — a normálisvektorok ellentétes irányítottsága miatt — két S felületre vett integrál különbségébe megy át, amelyekben az integrandusok a megfelelő oldalról vett határértékek. A Green-függvény és a feszültségek folytonosak a felületen, az $\vec{u}(\vec{r})$ elmozdulásvektor ugrása pedig éppen a \vec{b} Burgers-vektorral egyenlő, tehát

$$\begin{aligned} u_j(\vec{r}) &= \lim_{S_0 \rightarrow S} \oint_{S_0} [\sigma_{mk}(\vec{r}') U_{jm}(\vec{r} - \vec{r}') + u_i(\vec{r}') C_{iklm} U_{jm,l}(\vec{r} - \vec{r}')] dS'_k = \\ &= b_i \int_S C_{iklm} U_{jm,l}(\vec{r} - \vec{r}') dS'_k. \end{aligned} \quad (2)$$

A továbbiakban izotróp testek leírására szorítkozunk, ezért a rugalmas állandók II. (16) kifejezését és az U_{jm} Green-függvény tenzor II. (43) alakját helyettesítjük (2)-be:

$$\begin{aligned} u_j(\vec{r}) &= b_i \int_S [\lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + \mu (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl})] (A R_{,jlm} + B R_{,kkl} \delta_{jm}) dS'_k = \\ &= b_i \int_S [A \lambda \delta_{ik} R_{,kkj} + 2A \mu R_{,jik} + B \lambda \delta_{in} R_{,kkj} + B \mu (\delta_{jk} R_{,kki} + \delta_{ij} R_{,nnk})] dS'_k. \end{aligned} \quad (3)$$

Itt R a vizsgált \vec{r} helyvektorú pont és az integrálásnál a felületet befutó \vec{r}' pont közti távolság: $R = \sqrt{(\vec{r}_i - \vec{r}'_i)(\vec{r}_i - \vec{r}'_i)}$. Ha (3)-ba behelyettesítjük az A és B állandók

értékét, a következő alakra jutunk:

$$u_j(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi} b_j \int_S R_{,nnk} dS'_k + \frac{1}{8\pi} b_i \int_S (R_{,nni} dS'_j - R_{,nnj} dS'_i) - \\ - \frac{1}{4\pi} \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} b_i \int_S (R_{,jin} dS'_n - R_{,jnn} dS'_i). \quad (4)$$

Célunk az, hogy $u_j(\vec{r})$ -t vonalintegrálok formájában fejezzük ki. Ezt a Stokes-tétel segítségével érjük el, amelyet a következő általános alakban használunk fel:

$$\oint_G T dl_k = \int_S \varepsilon_{ijk} T_{,j} dS_i, \quad (5)$$

ahol T tetszőleges indexű tenzorfüggvény. A baloldali integrált az S felületet határoló zárt G görbe mentén kell képezni. Szorozzuk meg az (5) egyenlet mindkét oldalát ε_{klm} -mel és a jobboldalon álló szorzatot bontsuk Kronecker-delták szorzataira a II. (1) képlet alapján:

$$\oint_G \varepsilon_{klm} T dl_k = \int_S \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} T_{,j} dS_i = \int_S (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) T_{,j} dS_i = \int_S (T_{,m} dS_l - T_{,l} dS_m). \quad (6)$$

Ez lényegében a Green-tétel általános alakja, amelynek segítségével a (4) egyenlet jobboldalán álló második és harmadik integrál $T \rightarrow b_i R_{,nn}$ illetve $T \rightarrow b_i R_{,nj}$ megfeleltetéssel vonalintegrállá alakítható. Figyelembe kell venni, hogy az integrálás a vesszős koordináták szerint történik és ezért a (6)-ban szereplő deriválásokat azok szerint kell elvégezni. Mivel az integrandusok $(r_i - r'_i)$ függvényei, a végeredményt átírhatjuk a vesszőtlen koordináták szerinti deriváltakra:

$$u_j(\vec{r}) = \frac{b_j}{8\pi} \int_S R_{,nnk} dS'_k + \frac{b_i}{8\pi} \oint_G \varepsilon_{kij} R_{,nn} dl'_k + \frac{\lambda + \mu}{4\pi(\lambda + 2\mu)} b_i \oint_G \varepsilon_{kin} R_{,jn} dl'_k. \quad (7)$$

Mint látni fogjuk (2.2. §), a jobboldal első tagja is átalakítható vonalmenti integrállá, de közvetlenül is megmutatható, hogy értéke független az adott G görbére fektetett S felület alakjától. Az $R_{,nnk}$ derivált ugyanis a következőképpen alakítható át:

$$R_{,nnk} dS'_k = -2 \frac{(r_k - r'_k) dS'_k}{R^3} = -2 \frac{n_k dS'_k}{R^2} = -2 d\Omega, \quad (8)$$

ahol n_k a vizsgált \vec{r} pontból a $d\vec{S}$ felületelem felé mutató egységvektor k -adik komponense, $d\Omega$ pedig az elemi térszög, amelyben a $d\vec{S}$ felületelemet az \vec{r} pontból látjuk. (8) szerint a (7) jobboldalán álló első integrál értéke arányos az Ω térszöggel, amelyet az \vec{r} pontban az S felület kitölt — ez valóban független az S felület alakjától, és csak a G határgörbére jellemző adat. Ha ezt figyelembe vesszük és a másik két integrálba is behelyettesítjük R deriváltjainak megfelelő értékeket, továbbá a permutációs tenzorokkal kijelölt vektoriális szorzatokat átírjuk vektor-jelölésmódba, végleges

alakjában áll előttünk a Burgers-formula:

$$\vec{u}(\vec{r}) = -\frac{\vec{b}}{4\pi} \Omega(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \oint_G \frac{\vec{b}_x d\vec{l}'}{R} - \frac{\lambda + \mu}{4\pi(\lambda + 2\mu)} \nabla \oint_G \frac{\vec{b}_x R d\vec{l}'}{R}. \quad (9)$$

Képezzük ennek alapján az elmozdulásvektor integrálját egy olyan C zárt görbére, amely átfogja a G diszlokáció-görbét (l. 1. ábra). A (9) kifejezés utolsó két tagja a G görbe pontjaitól eltekintve mindenütt egyértékű, folytonos függvénye a helynek, ezért körintegráljuk eltűnik, tehát

$$\oint_c \vec{du} = -\frac{\vec{b}}{4\pi} \oint_c d\Omega. \quad (10)$$

Figyelembe véve, hogy az ábra szerinti körüljárásnál $\oint_c d\Omega = -4\pi$, (10) jobboldala éppen a Burgers-vektort adja:

$$\oint_c \vec{du} = \vec{b}. \quad (11)$$

Eredményünk a Burgers-vektor és a Burgers-kör fogalmának általánosítása rugalmas kontinuumra (ld. I. 2.1. §). Az eredeti definíció ezeket a fogalmakat csak kristályrácsban értelmezte, (11) alapján viszont azt mondhatjuk, hogy bármely, a kontinuumban felvett zárt C görbe \vec{b} Burgers-vektorú diszlokációt fog körül, ha a körintegrál értéke \vec{b} . Ha a C görbére fektetett felületen nem halad át diszlokáció, a körintegrál értéke nyilván zérus, mert \vec{u} akkor mindenütt egyértékű, folytonos függvénye a helynek. A fenti definíció nem alkalmazható, ha a C görbét úgy választjuk, hogy áthalad az anyag olyan tartományán, ahol az elmozdulásvektor nincs értelmezve (a diszlokáció centrumán). Mint látni fogjuk, kiépíthető a kontinuumelméletnek egy általánosabb formája, amelyben ez a probléma elkerülhető.

2.2. A Peach—Koehler-formula

A Burgers-formula alapján Peach és Koehler [4] nyomán eljuthatunk a diszlokációhurok környezetében fellépő feszültségek vonalintegrál formájában történő előállításához. Ennek érdekében a következőképpen fogunk eljárni: a (7) egyenlet mindkét oldalát deriválva előállítjuk az $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$ deformációs tenzort, majd ebből az izotróp testekre vonatkozó II. (17) összefüggést felhasználva a σ_{ij} feszültségtenzort is megkapjuk.

Deriváljuk a (7) egyenlet jobboldalának első tagját, és alkalmazzuk rá a Green-tétel (6) alakját a $T \rightarrow R_{,nnk}$ megfeleltetéssel:

$$\frac{b_j}{8\pi} \int_S R_{,nnkl} dS'_k = -\frac{b_j}{8\pi} \oint_G \varepsilon_{kli} R_{,nnk} dl'_i + \frac{b_j}{8\pi} \int_S R_{,nnkk} dS'_i.$$

Itt figyelembe vettük, hogy a deriválásnál a vesszős és vesszőtlen változók felcserélése (-1) -gyel való szorzást jelent. A jobboldal második tagja az $R_{,nnkk} = -8\pi \cdot \delta(R)$

azonosság figyelembevételével elhagyható, mert az integrál értéke csak a diszlokációvonalon különbözik zérustól, ott pedig már említett okokból nem alkalmazhatjuk a rugalmas kontinuum alapegyenleteit, tehát a belőlük levezetendő Peach—Koehler-formulát sem. Bevezetve II. (18) alapján a $v = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$ Poisson-féle számot az $u_{j,l}$ derivált a következő alakban írható:

$$u_{j,l} = \frac{1}{8\pi} \oint_G (-\varepsilon_{kli} b_j R_{,nnk} dl'_i + \varepsilon_{kij} b_i R_{,nnl} dl'_k - \frac{1}{1-v} \varepsilon_{kin} b_i R_{,jnl} dl'_k).$$

Ebből a deformációs tenzor:

$$\varepsilon_{jl} = \frac{1}{8\pi} \oint_G \left\{ \frac{1}{2} [\varepsilon_{kij} (b_i R_{,l} - b_l R_{,i}) + \varepsilon_{kil} (b_i R_{,j} - b_j R_{,i})],_{nn} - \frac{1}{1-v} \varepsilon_{kin} b_i R_{,lnj} \right\} dl'_k.$$

A $b_i R_{,m} - b_m R_{,i} = b_s R_{,r} (\delta_{is} \delta_{mr} - \delta_{ms} \delta_{ir}) = b_s R_{,r} \varepsilon_{tim} \varepsilon_{ssr}$ átalakítással a szögletes zárójelben leírt tagok a

$$\begin{aligned} b_s R_{,r} (\varepsilon_{til} \varepsilon_{tsr} \varepsilon_{kij} + \varepsilon_{tij} \varepsilon_{tsr} \varepsilon_{kil}) &= b_s R_{,r} \varepsilon_{tsr} (\varepsilon_{til} \varepsilon_{kij} + \varepsilon_{tij} \varepsilon_{kil}) \\ &= b_s R_{,r} \varepsilon_{tsr} (2\delta_{ik} \delta_{lj} - \delta_{ij} \delta_{lk} - \delta_{il} \delta_{jk}) = \\ &= b_s R_{,r} (2\varepsilon_{ksr} \delta_{ij} - \varepsilon_{jsr} \delta_{ik} - \varepsilon_{lsr} \delta_{jk}) \end{aligned}$$

rövidebb alakra hozhatók. Ezzel a deformációs tenzor:

$$\varepsilon_{jl} = \frac{1}{8\pi} \oint_G \left[b_s R_{,rpp} \left(\varepsilon_{ksr} \delta_{lj} - \frac{1}{2} \varepsilon_{jsr} \delta_{lk} - \frac{1}{2} \varepsilon_{lsr} \delta_{lk} \right) - \frac{1}{1-v} \varepsilon_{kin} b_i R_{,lnj} \right] dl'_k. \quad (12)$$

A feszültségtenzor számításához szükség van az ε_{il} összeg, a térfogati dilatáció kifejezésére:

$$\varepsilon_{il} = \frac{1}{8\pi} \oint_G b_s R_{,rpp} \left(2\varepsilon_{ksr} dl'_k - \varepsilon_{lsr} dl'_l - \frac{1}{1-v} \varepsilon_{kin} b_i R_{,lin} dl'_k \right).$$

Az összegező indexek átjelölésével és összevonással nyerjük:

$$\varepsilon_{il} = \frac{b_s}{8\pi} \frac{1-2v}{1-v} \varepsilon_{ksr} \oint_G R_{,rpp} dl'_k \quad (13)$$

II. (17) értelmében (12) 2μ -szörösét és (13) $\lambda\delta_{jl}$ -szeresét összeadva kapjuk a feszültségtenzor keresett alakját:

$$\sigma_{jl} = \frac{\mu b_s}{4\pi} \oint_G \left\{ \frac{1}{2} R_{,rpp} (\varepsilon_{srj} dl'_i + \varepsilon_{sri} dl'_j) + \frac{1}{1-v} \varepsilon_{ksr} (R_{,rlj} - \delta_{lj} R_{,rpp}) dl'_k \right\}. \quad (14)$$

Ez a Peach—Koehler-formula. A Burgers-formulához hasonlóan jelentősége abban áll, hogy nem tartalmaz a diszlokáció konstrukciójánál látszólag nagy szerepet játszó vágási felületre jellemző egyetlen paramétert sem.

3. Diszlokációk energiája

A diszlokációk elmozdulás- és feszültségterének ismeretében meghatározhatjuk a diszlokációk környezetében felhalmozott rugalmas potenciális energiát. Ezt nevezzük a diszlokáció sajátenergiájának.

A II. rész 4. §-ában tárgyaltuk a deformált testekben felhalmozott energiát. Megmutattuk, hogy ha a térfogati erők hatása elhanyagolható a deformációs energia felületi integrál formájában adható meg (II. 30):

$$P = \frac{1}{2} \oint \sigma_{ji} u_j dS_i. \quad (15)$$

Az (1) integrálhoz hasonlóan az integrálást a testet határoló összes felületre kell végezni. Végtelen kiterjedésű izotróp közegbe ágyazott diszlokáció-hurok energiájának meghatározásánál a Burgers-formula levezetésénél alkalmazott gondolatmenetet követve a következőképpen alakítjuk át a zárt felületre vett integrált:

$$E_S = \frac{1}{2} \lim_{S_0 \rightarrow S} \oint_{S_0} \sigma_{ji} u_j dS_i = \frac{1}{2} b_j \int_S \sigma_{ji} dS_i. \quad (16)$$

A (16) kifejezés (2)-höz hasonlóan látszólag függ az S vágási felület választásától. A (14) Peach—Koehler-formulában adott feszültségek felhasználásával (16)-ot kettős vonalintegrállá alakítjuk át, és ezzel megmutatjuk, hogy ez a függés valóban csak látszólagos.

Alakítsuk át (14) második tagjában ε_{krs} szorzóját a következőképpen:

$$\begin{aligned} R_{,rlij} - \delta_{ij} R_{,rpp} &= R_{,rmn} (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) = \\ &= R_{,rmn} \varepsilon_{ijm} \varepsilon_{inl}. \end{aligned}$$

Ezt felhasználva helyettesítsük (14)-et (16)-ba:

$$E_S = \frac{\mu b_s b_j}{8\pi} \int_S \oint_G \left[\frac{1}{2} R_{,rpp} (\varepsilon_{srj} dl'_i + \varepsilon_{srl} dl'_j) + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{ksr} \varepsilon_{ijm} \varepsilon_{inl} R_{,rmn} dl'_k \right] dS_i.$$

A jobboldal első tagja eltűnik, mert $\varepsilon_{jrs} b_s b_j$ a $-(\vec{b} \times \vec{b})$ vektorszorzat r -ik komponense; a második tag $T \rightarrow R_{,pp}$, a harmadik pedig $T \rightarrow R_{,rm}$ megfeleltetéssel az (5) Stokes-tétel segítségével vonalintegrállá alakítható:

$$E_S = \frac{\mu b_s b_j}{8\pi} \oint_G \oint_G \left\{ -\frac{1}{2} R_{,pp} dl_s dl'_j + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{ksr} \varepsilon_{ijm} R_{,rm} dl_i dl'_k \right\}. \quad (17)$$

Ezen általános energiaformula segítségével megmutatható, hogy síkgörbe mentén fekvő diszlokáció esetén, ha a Burgers-vektort egy a görbe síkjára merőleges \vec{b}^\perp és egy abban fekvő \vec{b}^\parallel komponensre bontjuk fel, akkor a teljes sajátenergiát

$$E_s = E_s^\perp + E_s^\parallel \quad (18)$$

adja meg, ahol E_s^\perp és E_s^\parallel az ugyanazon görbe mentén fekvő \vec{b}^\perp illetve \vec{b}^\parallel Burgers-

vektorú diszlokációk sajátenergiája. A bizonyításhoz írjuk a $\vec{b} = \vec{b}^{\perp} + \vec{b}^{\parallel}$ felbontást (17)-be:

$$\begin{aligned} E_s &= \frac{\mu(b_s^{\perp} + b_s^{\parallel})(b_j^{\perp} + b_j^{\parallel})}{8\pi} \oint \oint \left[-\frac{1}{2} R_{,pp} dl_s dl'_j + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} R_{,rm} dl_i dl'_k \right] = \\ &= E_s^{\perp} + E_s^{\parallel} + \frac{\mu b_s^{\perp} b_j^{\parallel}}{4\pi} \oint \oint \left[-\frac{1}{2} R_{,pp} dl_s dl'_j + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} R_{,rm} dl_i dl'_k \right]. \end{aligned}$$

Itt a második lépésben kihasználtuk, hogy a szögletes zárójelben levő tenzor s -ben és j -ben szimmetrikus. Válasszuk a koordináta-rendszerünk z tengelyét a diszlokáció síkjára merőlegesen, az x -tengelyt pedig a \vec{b}^{\parallel} komponenssel párhuzamosan. Ekkor

$$\vec{b}^{\perp} = (0, 0, b^{\perp}),$$

$$\vec{b}^{\parallel} = (b^{\parallel}, 0, 0),$$

$$\vec{dl} = (dl_1, dl_2, 0).$$

Ezek alapján egyszerűen belátható, hogy a sajátenergia legutolsó kifejezésében fellépő integrál eltűnik. Ugyanis az első tagban $b_s^{\perp} dl_s = 0$, másodikban pedig a permutációs tenzorok $j=1$ és $i=1,2$ miatt csak akkor nem tűnnek el, ha $m=3$; $r=1,2$. Mivel az ezen indexekhez tartozó R_{13} és R_{23} egyaránt $(z-z')$ -vel arányos, a $z=0$ síkban az integrandusnak ez a tagja is eltűnik. Ezt az eredményünket felhasználjuk köralakú diszlokációhurok energiájának számítására.

3.1. Köralakú csúszási hurok energiája

Csúszási huroknak (slip loop) olyan diszlokációhurokot nevezünk, amely a Burgers-vektort tartalmazó síkban fekszik.

Legyen a görbe síkja a $z=0$ sík és mutasson a Burgers-vektor az x -tengely irányába. Ekkor a (17) kiszámításához szükséges vektorok a 2. ábra alapján:

$$\vec{b} = (b, 0, 0),$$

$$\vec{dl} = (dx, dy, 0) = (\cos \vartheta, \sin \vartheta, 0) \cdot dl, \quad (19)$$

ahol ϑ az érintővektornak a Burgers-vektorral bezárt szöge. Ebből tetszőleges alakú csúszási hurok sajátenergiája:

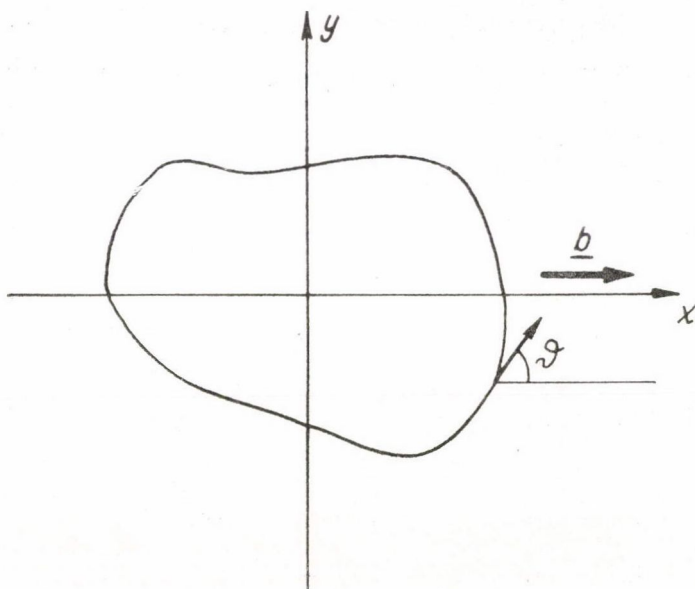
$$\begin{aligned} E_s &= \frac{\mu b^2}{8\pi} \oint \oint \left\{ -\frac{1}{2} R_{,pp} dx dx' - \frac{1}{1-\nu} R_{,33} dy dy' \right\} = \\ &= -\frac{\mu b^2}{8\pi} \oint \oint \left\{ \frac{dx dx'}{R} + \frac{1}{1-\nu} \frac{dy dy'}{R} \right\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Az utolsó lépésben felhasználtuk az $R_{,pp} = +2/R$ és $R_{,33}(z=0) = 1/R$ azonosságokat. A \vec{dl} ívelemhez tartozó dx, dy megváltozások (19) előállítását felhasználva eredményünket olyan alakra hozhatjuk, amelyből értelmezhető az egységnyi hosz-

szű ívelem E energiája;

$$E_s = -\frac{\mu b^2}{8\pi} \oint \left\{ \cos \vartheta \oint \frac{dx'}{R} + \frac{\sin \vartheta}{1-\nu} \oint \frac{dy'}{R} \right\} dl \quad (21)$$

$$E' = \frac{dE_s}{dl} = -\frac{\mu b^2}{8\pi} \left\{ \cos \vartheta \oint \frac{dx'}{R} + \frac{\sin \vartheta}{1-\nu} \oint \frac{dy'}{R} \right\}. \quad (22)$$



2. ábra: Csúszási diszlokáció hurok

Az egységnyi hosszúságú ívelem energiájának ez a kifejezése azonban nem származtatható egyértelműen (21)-ből, mert az teljesül akkor is, ha egy tetszőleges differenciálható ψ függvény gradienseként és az érintőirányú egységvektornak a skalárszorzatát E' -hez hozzáadjuk. Ennek a határozatlanságnak nyilván az az oka, hogy végtelen közegben véges *diszlokációs szakasz* nem létezhet, tehát értelmetlen feladat egy ilyen szakasz feszültségterét és az abban felhalmozott energiát keresni. Nem lehetséges tehát általánosságban a „vonalegység energiáját” megadni mint az ívelem és a Burgers-vektor által bezárt szög függvényét. Ez leolvasható (22) alakjából is: E' a görbe egyenletének funkcionáljaként adott. Bizonyos esetekben — például egyenes diszlokációnál — azonban a görbe szimmetriatulajdonságai alapján egyértelműen definiálható a vonalegységre vonatkoztatott energia, ezért lehet az egységnyi hosszúságú él- vagy csavardiszlokáció energiájáról beszélni. A következőkben általában is használni fogjuk a vonalegység energiája kifejezést, azonban fizikai tartalmát illetően a fentieket mindig szem előtt kell tartanunk.

Számítsuk ki r sugarú kör alakú diszlokáció esetében a (22) által definiált E' mennyiséget. A 3. ábra alapján az integrálban szereplő mennyiségeket a következő-

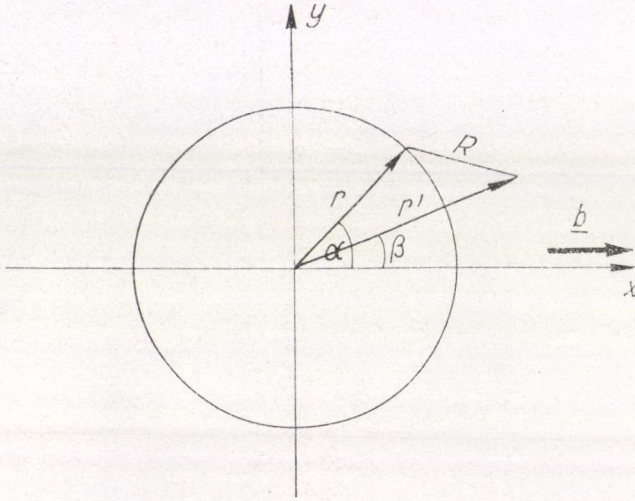
képpen írhatjuk át polárkoordinátákba:

$$R^2 = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\alpha - \beta)$$

$$x' = r \cos \alpha; \quad y' = r \sin \alpha;$$

$$dx' = -r \sin \alpha \, d\alpha; \quad dy' = r \cos \alpha \, d\alpha.$$

Ha elvégezzük még az $\alpha - \beta = \pi - 2\varphi$ [$\cos(\alpha - \beta) = 2 \sin^2 \varphi - 1$], valamint a $k^2 = 4rr'/(r+r')$ helyettesítéseket, továbbá kihasználjuk, hogy $\sin^2 \varphi$ π -ben peri-



3. ábra: Kör alakú diszlokáció hurok számításához

odik függvény, akkor a következő kifejezésekre jutunk:

$$\oint \frac{dx'}{R} = -\frac{4r \sin \beta}{r+r'} \int_0^{\pi/2} \frac{(2 \sin^2 \varphi - 1) d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} = \frac{4r \sin \beta}{(r+r')k^2} [(2 - k^2)K - E], \quad (23)$$

$$\oint \frac{dy'}{R} = \frac{4r \cos \beta}{r+r'} \int_0^{\pi/2} \frac{(2 \sin^2 \varphi - 1) d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} = \frac{4r \cos \beta}{(r+r')k^2} [(2 - k^2)K - E], \quad (24)$$

ahol K és E az első- ill. másodfajú elliptikus integrált jelenti. Az integrandus szingularitása miatt az integrálást természetesen nem végezhetjük pontosan a diszlokációvonal mentén, a diszlokáció centrumában a Peach—Koehler-formula, amelyből energia-formulánkat származtattuk, egyébként sem alkalmazható. Ezért a vesszős koordináták szerinti integrálást egy a diszlokáció-üreg felületén haladó $r' < r$ sugarú körre végezzük. Az elliptikus integrálok tulajdonságai alapján meg-

mutatható, hogy ha $r' = r - r_0$, ahol $r_0 \ll r$ a diszlokáció-üreg sugara, akkor

$$\frac{4r}{r+r'} \int_0^{\pi/2} \frac{2 \sin^2 \varphi - 1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} d\varphi \approx 2 \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right).$$

Felhasználva még, hogy

$$\sin \beta = -\cos \vartheta \quad \text{és} \quad \cos \beta = \sin \vartheta$$

a köralakú csúszási hurok egységnyi hosszúságú ívelemének energiája a következő alakú:

$$E' = -\frac{\mu b^2}{4\pi} \left(\cos^2 \vartheta + \frac{\sin^2 \vartheta}{1-\nu} \right) \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right). \quad (25)$$

Érdemes megjegyezni, hogy E' szögfüggésére ugyanezt az eredményt kapnánk, ha minden dl ívelemet $dl \cos \vartheta$ hosszúságú csavar- és $dl \sin \vartheta$ hosszúságú éldiszlokáció eredőjének tekintenénk.

A (25) energiát integrálva a körre, megkapjuk a diszlokációhurok teljes saját-energiáját:

$$E_s = \int_0^{2\pi} E' r d\vartheta = -\frac{\mu b^2 (2-\nu)}{4(1-\nu)} r \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right). \quad (26)$$

Eredményünk megegyezik az irodalomban ismert és más úton levezetett kifejezésekkel [5, 6, 7].

3.2. Prizmatikus hurok

Prizmatikus huroknak (prismatic loop) a Burgers-vektorra merőleges síkban fekvő diszlokációhurokot nevezzük. Ha tehát a görbe síkja az (xy) sík, a Burgers-vektor:

$$\vec{b} = (0, 0, b).$$

(17) alapján a teljes sajátenergia:

$$E_s = -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \oint \oint (R_{,xx} dy dy' - R_{,yy} dx dx' - R_{,xy} dx dy' - R_{,yx} dy dx').$$

Figyelembe véve, hogy $R_{,xx} + R_{,yy} = 1/R$, ez a következőképpen alakítható át:

$$\begin{aligned} E_s = & -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \left\{ \oint \oint \left(\frac{dx dx'}{R} + \frac{dy dy'}{R} \right) - \right. \\ & - \oint \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\oint R_{,x} dx' \right) dx + \frac{\partial}{\partial y} \left(\oint R_{,x} dx' \right) dy \right] - \oint \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\oint R_{,y} dy' \right) dx + \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial}{\partial y} \left(\oint R_{,y} dy' \right) dy \right] \right\}. \end{aligned}$$

Az utóbbi két integrál értéke zérus, mert teljes differenciálok zárt görbe mentén képzett vonalintegráljai, így a sajátenergia és az abból az előbbihez hasonló módon származtatható hosszegységre vonatkoztatott energia:

$$E_s = -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \oint \oint \left(\frac{dx dx'}{R} + \frac{dy dy'}{R} \right) =$$

$$= -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \oint \left(\cos \vartheta \oint \frac{dx'}{R} + \sin \vartheta \oint \frac{dy'}{R} \right) dl;$$

$$E' = -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \left(\cos \vartheta \oint \frac{dx'}{R} + \sin \vartheta \oint \frac{dy'}{R} \right). \quad (28)$$

Az itt szereplő elliptikus integrálok azonosak a (21) és (22) egyenletekben szereplőkkel, így az r sugarú kör alakú prizmatikus diszlokáció esetére (23), (24) és (25) alapján E' és E_s a következőképpen adható meg:

$$E' = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right), \quad (29)$$

$$E_s = \int_0^{2\pi} E \cdot r \cdot d\vartheta = -\frac{\mu b^3}{2(1-\nu)} r \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right). \quad (30)$$

Eredményünk szerint a vonalegység energiája független a ϑ szögtől, ami prizmatikus diszlokációnál várható is, hiszen a diszlokáció síkjában nincs kitéüntetett irány.

Felhasználva a síkgörbékre kapott (18) általános kifejezést tetszőleges (b_x, b_y, b_z) Burgers-vektorú kör alakú diszlokáció-gyűrű sajátenergiáját megadhatjuk (26) és (30) alapján:

$$E_s = -\frac{\mu}{2(1-\nu)} \left[\left(1 - \frac{\nu}{2} \right) (b_x^2 + b_y^2) + b_z^2 \right] r \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right).$$

4. Diszlokációkra ható erő

Az I. rész 5.1. §-ában foglalkoztunk a diszlokációra ható erő fogalmával. Ezen erő meghatározásánál a diszlokáció elmozdulása során végzett munkából indulunk ki. A folyamatban a külső feszültségek a diszlokáció feszültségterével szemben végeznek munkát, tehát a külső feszültségek és a diszlokáció feszültségterének kölcsönhatási energiáját megváltoztatják. A II. rész 4.2. §-ában meghatároztuk két független deformáció kölcsönhatási energiáját (II. (32)):

$$E_k = \int_V \sigma_{ik}^B \varepsilon_{ik}^A dV. \quad (31)$$

Ha itt ε_{ik}^A -val a diszlokáció által okozott deformációk tenzorát, σ_{ik}^B -vel pedig a $\sigma_{ik}^{(k)}$ külső feszültségeket azonosítjuk, a (31) kifejezés II. (28)-hoz hasonlóan felületi integrállá alakítható:

$$E_k = \oint_{S_0} \sigma_{ik}^{(k)} u_i dS_k.$$

Ha az S_0 felülettel mindkét oldalról végtelen pontosan megközelítjük az S vágási felületet, a Burgers-formula levezetésénél alkalmazott gondolatmenettel írhatjuk:

$$E_k = \lim_{S_0 \rightarrow S} \oint_{S_0} \sigma_{ik}^{(k)} u_i dS_k = b_i \int_S \sigma_{ik}^{(k)} dS_k. \quad (32)$$

Ezen eredményünk segítségével meghatározzuk a \vec{dl} diszlokációs szakasz δx -szel való elmozdítása során végzett munkát, és ezt $F_s \cdot \delta x_s$ skalárszorzat alakjába írva megkeressük az F_s erőkomponenseket. A (32) képlet szerint, amíg az elmozdulás olyan kicsiny, hogy eközben a diszlokációvonal által súrolt területen $\sigma_{ik}^{(k)}$ állandónak tekinthető, a kölcsönhatási energia megváltozása arányos a felület megváltozásával. A \vec{dl} szakasz $\vec{\delta x}$ elmozdulásával járó felületváltozást a két vektor vektoriális szorzataként írhatjuk fel:

$$\delta E_k = b_i \sigma_{ik}^{(k)} \varepsilon_{krs} dl_r \delta x_s = F_s \delta x_s.$$

Tetszőleges δx_s elmozdulásokra ez az egyenlőség csak akkor teljesülhet, ha a \vec{dl} diszlokációs szakaszra ható erő

$$dF_s = \varepsilon_{krs} b_i \sigma_{ik}^{(k)} dl_r. \quad (33)$$

Eredményünket vektori írásmóddal következőképpen írhatjuk [4]:

$$\vec{dF} = [(\sigma^{(k)} \cdot \vec{b}) \times \vec{dl}].$$

5. Diszlokációhurok egyensúlyi alakja

Eddigi megfontolásaink során hallgatólagosan stacionárius diszlokációkat tárgyaltunk, és nem foglalkoztunk azzal a kérdéssel, hogy mi stabilizálja az adott görbe mentén fekvő diszlokációt. A 2. §-ban leírt módon tetszőleges görbe mentén létrehozhatunk diszlokációt; a Burgers- és a Peach—Koehler-formula bármilyen diszlokációvonal körül kialakuló elmozdulás- és feszültségteret megadja. Az I. rész 3. §-ában láttuk azonban, hogy a diszlokációk mozgásra képesek, tehát adott külső feszültség esetén nyilván az energetikailag legkedvezőbb görbe alakot vesz fel. Foglalkoznunk kell tehát azzal a kérdéssel, hogy mi tünteti ki az energetikailag legkedvezőbb görbét, és milyen erők kiegyenlítődése hozza létre az egyensúlyt.

5.1. Az egyensúlyi feltétel

Feladatunkat variációs módszerrel oldjuk meg. Legyen a görbe egyenlete $x_k = x_k(u)$, paraméteres alakban adott. Az egyensúlyi görbének bármely $\delta x_k(u)$ megváltoztatására a külső erők által végzett munka és a sajátenergia megváltozásának algebrai összege zérus.

Képezzük először a (17) energia kifejezés variációját. Írjuk át e célból az integrálokat az u paraméter szerinti integrálokká:

$$E_s = \frac{\mu b_s b_j}{8\pi} \oint \oint \left\{ -\frac{1}{2} R_{,pp} \dot{x}_s \dot{x}_j' + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} R_{,rm} \dot{x}_i \dot{x}_k' \right\} du du'. \quad (34)$$

(Az u paraméter szerinti deriválást ponttal jelöltük.) Mindkét integrált ugyanarra a görbére kell képezni, ezért a variálást a vesszős és a vesszőtlen koordináták szerint egyaránt el kell végeznünk. Mivel (34) a kétféle koordinátában szimmetrikus kifejezés, a két esetben kapott eredmény az összegező indexek és integrációs változók alkalmas átjelölésével azonos alakra hozható, így elegendő például a vesszőtlen koordináták szerint végezni a variációt és a végeredményt kettővel szorozni:

$$\delta E_s = \frac{\mu b_s b_j}{4\pi} \oint \oint \left\{ -\frac{1}{2} (R_{,pp} \delta \dot{x}_s dl'_j + R_{,ppn} \delta x_n \dot{x}_s dl'_j) + \right. \\ \left. + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} (R_{,rm} \delta \dot{x}_i dl'_k + R_{,rmn} \delta x_n \dot{x}_i dl'_k) \right\} du.$$

A $\delta \dot{x}_s$ -ot tartalmazó tagokban parciális integrálást hajtunk végre, és a kapott eredményből kiemeljük δx_i -et:

$$\delta E_s = \frac{\mu b_s b_j}{4\pi} \oint \oint \left\{ \frac{1}{2} R_{,ppn} (\delta x_s \dot{x}_n - \delta x_n \dot{x}_s) dl'_j + \right. \\ \left. + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} R_{,rmn} (\delta x_n \dot{x}_i - \delta_i \dot{x}_n) dl'_k \right\} du = \\ = \frac{\mu b_s b_j}{4\pi} \oint \oint \left\{ \frac{1}{2} R_{,ppn} (\delta_{ls} \delta_{nq} - \delta_{nl} \delta_{qs}) dl'_j + \right. \\ \left. + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} R_{,rmn} (\delta_{nl} \delta_{iq} - \delta_{il} \delta_{qn}) dl'_k \right\} \delta x_l dl_q = \\ = \frac{\mu b_s b_j}{4\pi} \oint \oint \left\{ \frac{1}{2} R_{,ppn} \varepsilon_{ins} dl'_j + \frac{1}{1-\nu} \varepsilon_{krs} \varepsilon_{ijm} \varepsilon_{tin} R_{,rmn} dl'_k \right\} \varepsilon_{lq} \delta x_l dl_q = \\ = -b_j \oint \sigma_{jt}^{(d)} \varepsilon_{lqt} \delta x_l dl_q. \quad (35)$$

Az utolsó lépésben felhasználtuk a Peach—Koehler-formulát, és az $\varepsilon_{snj} b_j b_s = 0$ azonosságot. $\sigma_{jt}^{(d)}$ azt a feszültséget jelöli, amelyet a diszlokációhurok egy pontján a hurok többi része létrehoz. A $\sigma_{jt}^{(d)}$ feszültségek, amint azt a (35) formulából is leolvashatjuk, éppen a diszlokációvonal pontjaiban szingulárisak. Ezt mindeddig nem vettük figyelembe a számításainkban: valahányszor a vágási felület mentén képzendő integrálokat Stokes tételének segítségével vonalmenti integrállá alakítottuk át, a vonalintegrálokat a diszlokációvonal mentén jelöltük ki, és a továbbiakban az így kapott szinguláris mennyiségekkel számoltunk. Az energia konkrét kiszámításánál az ebből adódó nehézségeket úgy kerültük el, hogy a kettős integrál egyik változója szerint egy feltételezett r_0 sugarú üreg határán fekvő görbe mentén képeztük az integrált. Ez az eljárás a $\sigma_{jt}^{(d)}$ feszültségek számításánál azonban nem vezet egyértelmű eredményre, mert mint arról akár a (35) formula segítségével, akár közvetlen szemlélet alapján meggyőződhetünk, az üreg átellenes falain ellentétes előjellel divergáló feszültségek jelentkeznek. A probléma egzakt megoldását

természetesen az üreg falán kielégítendő határfeltételek figyelembevétele jelentené. A határfeltételek az ún. képfeszültségek bevezetését teszik szükségessé, melyek az ellentétes előjellel divergáló feszültségeket kikompenzálják.

A képfeszültségek meghatározásával járó matematikai nehézségek elkerülésére Brown [8] gondolatmenetét követve definiáljuk a diszlokáció sajátfeszültségét:

$$\sigma_{jt}^{(s)}(\vec{r}) = \frac{1}{2} (\sigma_{jt|+r_0}^{(d)} + \sigma_{jt|-r_0}^{(d)}). \quad (36)$$

Itt $\sigma_{jt| \pm r_0}^{(d)}$ a Peach—Koehler- formula által megadott $\sigma_{jt}^{(d)}$ feszültség értékét jelöli a diszlokációvonalon levő \vec{r} ponttól a főnormális mentén $\pm r_0$ távolságra fekvő pontokban. Látható, hogy a (36) definícióban az e két pontban ellentétes előjellel divergáló feszültségek nem jutnak szerephez. Nyilvánvaló, hogy az energia kifejezésében fellépő logaritmikus szingularitások esetében $E|_{+r_0} = E|_{-r_0}$ tehát a (35) formulára vezető számításaink kezdetén választhattuk volna a szingularitások ugyanilyen módon történő elkerülését. Ez esetben a sajátenergia variációjában a (35) divergens integrál helyett a (36) sajátfeszültség jelenik meg:

$$\delta E_s = -b_j \oint \sigma_{jt}^{(s)} \varepsilon_{tql} \delta x_l dl_q. \quad (37)$$

A diszlokációgörbe δx_l megváltozásakor végzett munkát a (33)-ban adott erő segítségével számíthatjuk:

$$\delta L = \varepsilon_{tql} b_j \oint \sigma_{jt}^{(k)} \delta x_l dl_q.$$

Utóbbi eredményünket (37)-tel összevonva megkapjuk az egyensúly feltételét:

$$\delta L - \delta E_s = \oint \{ \sigma_{jt}^{(k)} + \sigma_{jt}^{(s)} \} \varepsilon_{tql} b_j \delta x_l dl_q = 0.$$

Az integrál bármely δx_l -re csak akkor tűnhet el, ha az integrandus eltűnik, vagyis az egyensúlyi görbét az tünteti ki, hogy minden ívelemére teljesül a

$$\{ \sigma_{jt}^{(k)} + \sigma_{jt}^{(s)} \} \varepsilon_{tql} b_j dl_q = 0 \quad (38)$$

egyenlőség. Ezt összevetve az erő (33) kifejezésével eredményünk könnyen értelmezhető: egyensúlyban a diszlokációhurok bármely ívelemén a külső- és sajátfeszültségekből eredő erők egyensúlyt tartanak. Ez az eredmény, amely nyilvánvalóan a diszlokációra ható erő definíciójának következménye, mint látni fogjuk, alapvető szerepet játszik a vonalmenti feszültség értelmezésében.

5.2. A vonalmenti feszültség

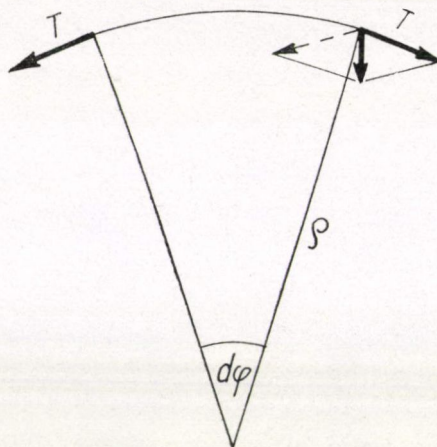
Az előző §-ban megvizsgáltuk, hogy mi tünteti ki azon görbéket, amelyek mentén adott külső feszültség mellett a diszlokációhurok energiája minimális. Nem foglalkoztunk azzal a kérdéssel, hogy milyen mozgással juthat valamely diszlokáció az egyensúlyi állapotba. Mint azt az I. rész 3. §-ában láttuk, a diszlokációk mozgása nem minden irányban történik azonos mechanizmussal. Míg a csúszómozgás során a kritikus csúsztatófeszültséget meghaladó feszültségek munkája csak a diszlokáció energiáját növeli, addig a kúszómozgás során ponthibák keltéséhez is szükséges.

energia befektetés. Ha ehhez nem áll elegendő termikus energia rendelkezésre, és a (38) feltétel által kitüntetett egyensúlyi görbealak elérése csak nem-konzervatív mozgással lehetséges, akkor az egyensúlyi görbealak nem valósul meg. A következőkben csak csúszási hurkokkal foglalkozunk, ahol ez a probléma nem merül fel.

Az egyensúlyi feltételből következik, hogy ha nincs külső feszültség, akkor nem létezik egyensúlyi görbealak, mert a diszlokációhurok bármely kiszemelt íveleme a sajátfeszültség hatása alatt olyan irányban mozdul el, hogy a diszlokációhurok felülete csökkenjen, és ez végül arra vezet, hogy a diszlokáció egyetlen pontra zsugorodik és megsemmisül.

Ezt a jelenséget egy vízcsepp felületi feszültségének analógiájára értelmezhetjük úgy is, hogy a diszlokációvonal minden ívelemének végpontjain érintőirányú feszítőerők működnek. Ezt az erőt nevezzük vonalmenti feszültségnek.

Jelöljük a vonalmenti feszültséget T -vel, és vizsgáljuk meg milyen erőhatást eredményez egy ϱ görbületi sugarú diszlokáció ívelemre. A $d\vec{l}$ ívelem két végén ható T feszítő erők eredője (4. ábra) a görbületi középpont felé mutat, és nagysága



4. ábra: Vonalmenti feszültség definíciójához

$$dF' = 2T \sin \frac{d\varphi}{2} = T \frac{dl}{\varrho}.$$

Az egységnyi szakaszra ható erő tehát

$$F = \frac{T}{\varrho}. \quad (39)$$

A vonalmenti feszültség fogalmát Mott és Nabarro [9] vezette be, és a felületi feszültség analógiájára a vonalegység energiájával azonosította. De Wit és Koehler [10] két végén rögzített diszlokációs szakasz csúszási síkban felvett egyensúlyi alakját tanulmányozva arra az eredményre jutottak, hogy a vonalmenti feszültséget

$$T = E(\vartheta) + \frac{d^2 E(\vartheta)}{d\vartheta^2} \quad (40)$$

kifejezés adja meg (ϑ az érintő és a Burgers-vektor által bezárt szög.) Megmutatható, hogy általában (40) második tagja nem elhanyagolható az elsőhöz képest, sőt azzal azonos nagyságrendű.

A (38) egyensúlyi feltétel alapján egyszerűen kifejezhető a csúszási hurok vonalmenti feszültsége. Válasszuk a koordinátarendszerünket ismét úgy, hogy a diszlokációgörbe az (xy) síkban feküdjék, a Burgers-vektor pedig az x -tengellyel pár-

huzamos legyen. Ekkor (38) és (39)-ből

$$T = -\sigma_{13}^{(k)} b \varrho = \sigma_{13}^{(s)} b \varrho. \quad (41)$$

Fejazzük ki $\sigma_{13}^{(s)}$ -et a Peach—Koehler-formula és (36) segítségével:

$$\sigma_{13}^{(s)} = \frac{\mu b}{8\pi} \left[\frac{\partial}{\partial y} \oint \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right) dx' - \frac{1}{1-\nu} \frac{\partial}{\partial x} \oint \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right) dy' \right]. \quad (42)$$

A $+$ és $-$ indexek a normálison elhelyezkedő, a diszlokációvonalától $+r_0$ ill. $-r_0$ távolságra levő pontokban képzett integrálokat jelentik. (42)-t (41)-be helyettesítve explicit formulát adhatunk meg a vonalmenti feszültségre:

$$T = \frac{\mu b^2}{8\pi} \varrho \left[\frac{\partial}{\partial y} \oint \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right) dx' - \frac{1}{1-\nu} \frac{\partial}{\partial x} \oint \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right) dy' \right]. \quad (43)$$

Eredményünk semmilyen feltételezést vagy közelítést nem tartalmaz. Ez azért lényeges, mert az irodalomban a vonalmenti feszültséget vagy a vonalegység energiájával, vagy a (40) alatti kifejezéssel azonosítják. A 3.1. §-ban mondottak értelmében azonban E nem definiálható egyértelműen, így a vonalmenti feszültség (40), vagy ahhoz hasonló megadása sem egyértelmű. Ezt világosan mutatja az a tény, hogy a (40) összefüggés a 3.1. §-ban említett ψ függvény speciális és esetenként különböző megválasztása mellett egyezik meg (43)-mal. Ezt a következőképpen láthatjuk be.

Vezessük be a

$$\vec{\Phi} = (\Phi_x, \Phi_y, 0)$$

vektort, amelynek komponensei definíció szerint

$$\Phi_x = \frac{\mu b}{8\pi} \oint \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right) dx'; \quad \Phi_y = \frac{\mu b}{8\pi} \cdot \frac{1}{1-\nu} \oint \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right) dy'.$$

A diszlokációhurok sajátfeszültsége valamint teljes sajátenergiája (21) és (41) alapján kifejezhető $\vec{\Phi}$ -vel:

$$\sigma_{13}^{(s)} = -(\text{rot } \vec{\Phi})_z \quad (44)$$

$$E_s = -\frac{b}{2} \oint (\vec{\Phi}, d\vec{l}). \quad (45)$$

Legyen adva a diszlokáció vonal paraméteres egyenlete $x=x(\vartheta)$, $y=y(\vartheta)$ alakban, ahol ϑ a Burgers vektor és az ívelem által bezárt szög: (A következőkben a ϑ szerinti differenciálást ponttal jelöljük.) A görbe egy pontjában az \vec{n} érintőirányú egységvektor komponensei

$$\vec{n} = (\cos \vartheta, \sin \vartheta, 0), \quad \text{ezzel} \quad d\vec{l} = \vec{n} dl. \quad (46)$$

(22)-höz hasonlóan (45)-ből megadhatjuk a vonalegység energiáját, de vegyük figyelembe, hogy (45) integrandusa megváltoztatható egy tetszőleges ψ differenciálható függvény gradienseinek hozzáadásával, hiszen $\oint \psi_{,k} dl_k = 0$, ezért

$$E' = \frac{dE_s}{dl} = -\frac{b}{2} [(\vec{\Phi}, \vec{n}) + (\vec{n}, \text{grad } \psi)].$$

Felhasználva, hogy $\vec{n} = -\vec{n}$, egyszerűen adódik, hogy

$$E' + \ddot{E}' = -\frac{b}{2} [2\dot{n}_i \dot{\Phi}_i + 2\dot{n}_i \dot{\psi}_{,i} + n_i (\ddot{\Phi}_i + \ddot{\psi}_{,i})]. \quad (47)$$

Válasszuk ψ -t úgy, hogy teljesüljön a

$$2\dot{n}_i \dot{\psi}_{,i} + n_i (\ddot{\Phi}_i + \ddot{\psi}_{,i}) = -2\rho \dot{n}_i n_k \Phi_{k,i} \quad (48)$$

egyenlet, ahol $\rho = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}$ a görbületi sugár. Ezt (47)-be helyettesítve, és figyelembe véve, hogy

$$\dot{n}_i \dot{\Phi}_i = \dot{n}_i (\Phi_{i,k} \dot{x}_k) = \rho n_i n_k \Phi_{i,k}$$

a következő kifejezést kapjuk:

$$E' + \ddot{E}' = -\frac{b}{2} [2\rho \dot{n}_i n_k \Phi_{i,k} - 2\rho \dot{n}_i n_k \Phi_{k,i}] = -\rho b \dot{n}_i n_k [\Phi_{i,k} - \Phi_{k,i}],$$

Beírva ide n_i (44) előállítását és az

$$\vec{n} = (-\sin \theta, \cos \theta, 0)$$

vektor megfelelő komponenseit:

$$E' + \ddot{E}' = \rho b (\Phi_{1,2} - \Phi_{2,1}) (n_1 \dot{n}_2 - n_2 \dot{n}_1) = \rho b (\Phi_{1,2} - \Phi_{2,1}) = -\rho b (\text{rot } \Phi)_z.$$

Ezt összevetve (41)-gyel és (44)-gyel állításunk igazolását kapjuk. A ψ függvényt meghatározó (48) egyenletnek nem minden esetben van megoldása. A (22) alatt definiált vonalegység energia és a (40) összefüggés alkalmazása akkor és csak akkor vezet exakt eredményre, ha (48) megoldása $\psi = \text{konst.}$ Ez annyit jelent, hogy a (40) képlet az általános esetben nem alkalmazható. Megmutatható azonban, hogy a végtelen hosszú egyenes diszlokációk határesetében (40) helyesen adja a vonalmenti feszültséget.

Állításunk bizonyítására a (48) egyenletet használjuk fel; kimutatjuk, hogy a $\rho \rightarrow \infty$ határesetében $\psi = \text{konst.}$ megoldása az egyenletnek. Mivel a ϑ paraméter egyenes diszlokáció esetében nem alkalmas a görbe leírására a $\rho \rightarrow \infty$ határátmenet elvégzése előtt kifejezzük a ϑ szerinti deriváltakat x és y szerinti parciális deriváltakkal:

$$2\dot{n}_k n_i \rho \psi_{,ki} + \rho^2 n_i n_k n_l (\Phi_{k,il} + \psi_{,kil}) + 2n_i \dot{n}_k (\Phi_{k,i} + \psi_{,ki}) = -2n_k \dot{n}_i \Phi_{k,i}$$

A $\rho \rightarrow \infty$ esetben a baloldal második tagja adja meg az egyenlet asszimptotikus alakját:

$$n_i n_k n_l (\Phi_{k,il} + \psi_{,kil}) = 0.$$

$\vec{\Phi}$ komponenseinek második deriváltjaiban az integrandus minden esetben R^{-3} -al arányos. Ez viszont végtelen egyenes esetén x' -nak és y' -nak egyaránt páratlan függvénye, vagyis a megfelelő integrálok eltűnnek, tehát ψ -re a következő egyenletet kapjuk:

$$n_i n_k n_l \psi_{,kil} = 0,$$

aminek a $\psi = \text{konst.}$ megoldása.

5.3. Köralakú csúszási hurok vonalmenti feszültsége

Az alábbiakban a (42) képlet segítségével meghatározzuk köralakú csúszási hurok sajátfeszültségét, majd abból (43) alapján a vonalmenti feszültséget.

A $\sigma_{13}^{(d)}$ feszültség meghatározásához képeznünk kell a (23) és (24) integrálok y , ill. x szerinti parciális deriváltjait, amelyeket az r és β polárkoordináták szerinti deriváltakkal fejezhetünk ki:

$$\frac{\partial}{\partial y} \oint \frac{dx'}{R} = -\frac{\cos^2 \beta}{R} I_0 - \sin^2 \beta \frac{\partial I_0}{\partial r};$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \oint \frac{dy'}{R} = \frac{\sin^2 \beta}{r} I_0 - \cos^2 \beta \frac{\partial I_0}{\partial r},$$

$$\text{ahol } I_0 = \frac{4r}{(r+r')k^2} [(2-k^2)K - E].$$

Helyettesítsük a deriváltakat (42)-be:

$$\sigma_{13}^{(d)} = -\frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)} \left[(2-\nu) \left(\frac{I_0}{r} + \frac{\partial I_0}{\partial r} \right) - \nu \cos 2\beta \left(\frac{I_0}{r} - \frac{\partial I_0}{\partial r} \right) \right].$$

Az r szerinti parciális deriváltakat az elliptikus integrálokra vonatkozó

$$\frac{dE(k)}{dk} = \frac{E-K}{k}; \quad \frac{dK(k)}{dk} = \frac{1}{k} \left(\frac{E}{1-k^2} - K \right)$$

összefüggések segítségével számítjuk [8], majd a kapott eredményben k -t kifejezzük r és r' -vel és a tagokban különválasztjuk a $(r'-r)^{-1}$ -nel arányos járulékokat:

$$\sigma_{13}^{(d)} = -\frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \left[\left(2-\nu - \frac{2r'^2+r^2}{r'^2} \nu \cos 2\beta \right) \frac{1}{r+r'} K + 2 \frac{r+r'}{r'^2} \nu \cos 2\beta E + \frac{2-\nu(1-\cos 2\beta)}{r-r'} E \right].$$

A sajátfeszültség (36) definíciója értelmében ezen kifejezés $r-r'=r_0$ ill. $r'-r=r_0$ helyettesítéssel adódó értékeinek számtani közepét kell képezni, aminek során nyilván az utolsó tag járuléka kiesik, a többi tagból pedig a sajátfeszültség következő alakja adódik:

$$\sigma_{13}^{(s)} = -\frac{\mu b}{8\pi r(1-\nu)} \left[(2-\nu-3\nu \cos 2\beta) \ln \frac{8r}{r_0} + 8\nu \cos 2\beta \right].$$

Mivel a görbületi sugár állandó, (41) alapján egyszerűen kapjuk a vonalmenti feszültség explicit alakját:

$$T = r\sigma_{13}^{(s)}b = -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \left[(2-\nu+3\nu \cos 2\theta) \ln \frac{8r}{r_0} - 8\nu \cos 2\theta \right]. \quad (49)$$

(A β polárszög helyett a Burgers-vektor és a diszlokáció-vonal érintője által bezárt θ szöget hoztuk be.)

Hasonlítsuk össze eredményünket a (40)-ből erre az esetre számítható kifejezéssel. A (25) felhasználásával a következő eredményre jutunk:

$$T = -\frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \left[(2-\nu+3\nu \cos 2\vartheta) \left(\ln \frac{8r}{r_0} - 2 \right) \right]. \quad (50)$$

A kétféle módon számított (49) és (50) eredmények nemcsak zérus körintegrálú tagokban különböznek egymástól, ami arra enged következtetni, hogy a (48) egyenletnek ebben az esetben nincs megoldása. A logaritmikus tag együtthatója azonban egyezik a két esetben, és mivel nagy r értékekre ez adja a lényeges járulékot, ez azt mutatja, hogy minél nagyobb a görbületi sugár, annál pontosabban közelíti meg (40) a vonalmenti feszültség tényleges értékét.

IRODALOM

- [1] Kovács István, Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 181, 1965.
- [2] de Chatel Péter és Kovács István, Magyar Fizikai Folyóirat. 12, 383, 1965.
- [3] J. M. Burgers, Proc. Koninkl. Ned. Acad. Wetenschap. 42, 293, 1939.
- [4] M. O. Peach, J. S. Koehler, Phys. Rev. 80, 436, 1950.
- [5] R. de Wit, Solid State Physics, 10, 249, 1960.
- [6] E. Kröner, Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, Ergeb. angew. Math. 5, 1958.
- [7] Y. T. Chou and J. D. Eshelby, J. Mech. Phys. Solids, 10, 27, 1962.
- [8] L. M. Brown, Phil. Mag. 10, 105, 1964.
- [9] N. F. Mott and F. R. N. Nabarro, Report on Strength of Solids 1948. (London, The Physical Society.)
- [10] G. de Wit and J. S. Koehler, Phys. Rev. 116, 1113, 1959.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A KVANTUMMECHANIKÁRÓL II.*

M. BORN, W. HEISENBERG, P. JORDAN

A dolgozat I. részében *Heisenberg* alapfeltevéseiből kiindulva kiépített kvantummechanikát általánosítjuk tetszőleges számú szabadsági fok esetére. A perturbációelméletet kifejthetjük nem-elfajult rendszerekre és az elfajult rendszerek egy kiterjedt osztályára, és megmutatjuk kapcsolatát a hermitikus alakok sajátértékeinek elméletével. A nyert eredményeket felhasználjuk az impulzus- és az impulzusmomentum-tétel levezetésére, valamint kiválasztási szabályok és intenzitásképletek levezáraztatására. Végül az elmélet alapfeltevéseit egy üreg sajátrezgéseinek statisztikájára alkalmazzuk.

Bevezetés

A jelen dolgozat megkísérli azon általános kvantumelméleti mechanika továbbbi kiépítését, amelynek fizikai és matematikai alapjait a szerzők két korábbi dolgozatukban¹ fejtették ki. Lehetségesnek bizonyult a mondott elméletet több szabadsági fokú rendszerekre kiterjeszteni² (2. fej.) és a „kanonikus transzformációk” bevezetésével a mozgásegyenletek integrálásának feladatát ismert matematikai kérdésfeltevésekre visszavezetni; ezen kanonikus transzformációk elmélete segítségével egyrésről a klasszikus perturbációelmélettel messzemenő hasonlóságot mutató perturbációelméletre jutottunk (1. fej. 4. §), másrésről kapcsolatot találtunk a kvantummechanika, valamint a végtelen sok változós kvadratikus alakok matematikailag oly nagymértékben kifejlesztett elmélete között (3. fej.). — Mielőtt azonban rátérnénk az elmélet ezen további fejleményeinek ismertetésére, megkíséreljük fizikai tartalmának pontosabb körvonalazását.

A javasolt elmélet kiindulópontját az a meggyőződés képezte, hogy a nehézségeken, melyekkel a kvantumelméletben éppen az utóbbi években lépten-nyomon találkozunk, mindaddig lehetetlen úrrá lennünk, amíg az atomok és elektronok mozgásának mechanikája számára az elvileg megfigyelhető mennyiségek között fennálló összefüggéseknek a klasszikus mechanika rendszeréhez hasonlóan egyszerű és egységes rendszere nem áll rendelkezésre. A megfigyelhető mennyiségek között fennálló kvantumelméleti összefüggések ilyen rendszerének az eddigi kvantumelmélettel szemben minden esetre szükségzerű fogyatékossága, hogy nem adható neki közvetlen szemléletes geometriai értelmezés, hiszen az elektronok mozgása nem írható le a tér és az idő számunkra megszokott fogalmai segítségével; az új elméletnek jellemző vonása lesz, hogy épp annyira jelenti az eddigi kinematika megváltoztatását, mint az eddigi mechanikáét; fontos előnye lesz azonban ennek a kvantummechanikának, hogy a kvantumelmélet alapposztulátumai e mechanika tökéletesen organikus részét képezik, hogy tehát pl. a diszkrét stacionárius állapotok létezése az új elmélet számára éppoly természetes, mint mondjuk a sajátrezgések diszkrét

* ZS. f. Phys. 35, 557, 1926.

frekvenciáié a klasszikus elmélet számára (vö. 3. fej.). Szem előtt tartva éppen a kvantumelmélet és a klasszikus elmélet között fennálló alapvető, a kvantumelméleti alapposztulátumok adta különbségeket, úgy látszik számunkra, hogy a formalizmus, melynek kidolgozására a fent idézett két dolgozatban és a következőkben kísérletet tettünk, amennyiben helyesnek bizonyulna, olyan kvantummechanikát képez, mely annyira hasonló a klasszikus mechanikához, amennyire azt egyáltalán bárki is remélhette. Itt csak az energia- és az impulzustétel érvényességére és a mozgásegyenletek alakjára emlékeztetünk (1. fej. 2. §). Az új és a klasszikus elmélet e hasonlóságának felel meg az is, hogy ezen elmélet mellett nyilván nem lehet szó valamiféle önnálló korrespondencia-elvekről; inkább maga az elmélet fogható fel mint a korrespondencia Bohr-féle gondolatának egzakt megfogalmazása. Az elmélet további fejlesztésének fontos feladata lesz ezen korrespondencia jellegének pontosabb vizsgálata, és az átmenet leírása, mely a szimbolikus kvantumgeometriából kiindulva elvezet a szemléletes klasszikus geometriához. Tekintettel erre a kérdésre, az új elmélet különösen lényeges vonásának látszik számunkra, hogy abban az atomok folytonos és vonalas színepei egyenjogúan lépnek fel egymás mellett, azaz: egy és ugyanazon mozgásegyenlet megoldásaiként adódnak és matematikailag szoros kapcsolatban állnak egymással (vö. 3. fej. 3. §); ebben az elméletben nyilvánvalóan értelmét veszíti a „kvantált” és „kvantátlan” mozgások között tett különbség, minthogy itt nincs szó olyan kvantumfeltételről, mely meghatározott mozgásokat választ ki nagyszámú lehetséges megoldás közül; ezen feltétel helyét egy kvantummechanikai alapegyenlet foglalja el (1. fej. 1. §), melynek érvénye minden lehetséges mozgásra kiterjed és amely szükséges ahhoz, hogy a mozgás-probléma egyáltalán határozott értelmet nyerjen.

Noha azon elméletnek, amelynek kifejtésére itt kísérletet teszünk, matematikailag egységes jellege és egyszerűsége alapján szeretnénk arra következtetni, hogy az az atomszerkezet problémái esetében már a valóságos viszonyok lényeges vonásait tükrözi vissza, tisztában kell lennünk azzal, hogy az elmélet még nem adhatja meg a kvantumelmélet elvi nehézségeinek megoldását. A klasszikus elmélet sugárzási visszahatásának megfelelő erők beépítése az elméletbe még nem történt meg, és ami a csatolás problémája és az itt vizsgált kvantummechanika között fennálló kapcsolatot illeti, csak egyes határozatlan körvonalak rajzolódtak ki (vö. 1. fej. 5. §). Ennek ellenére úgy látszik, mintha a kvantumelmélet ezen elvi nehézségei az új elmélet szemszögéből tekintve másként festenének mint eddig, és mintha a remény ezen problémák majdani megoldására az eddiginél megalapozottabb volna. Gondoljunk pl. az ütközési folyamatok kérdésére. Azokra az elvi nehézségekre, amelyek az eddigi elméletben útját állják a kvantumelmélet alapposztulátumai és az energiatétel érvénye egyesítésének a nagy sebességű ütközések esetében, különösen *Bohr*³ mutatott rá az utóbbi időben. Az itt vizsgált elméletben mind az alapposztulátumok, mind az energiatétel a kvantummechanikai egyenletek matematikai folyományaként adódnak és így a Frank—Hertz-féle ütközési kísérletek eredményei az elmélet természetes következményének látszanak; ennél fogva remélhetjük, hogy az ütközési problémáknak a jövőben a kvantummechanika alapján elvégzendő tárgyalásában éppen az organikus kapcsolat folytán, mely az alapposztulátumok és ezen mechanika között fennáll, az említett fajtájú nehézségek nem merülnek fel.

Az anomális Zeeman-effektus kérdéskomplexuma az itt vizsgált elmélet szemszögéből tekintve egyelőre aligha mutat más képet mint eddig. Az „aperiodikus”

és „periodikus pályák” benső kapcsolata, mely ezen elmélet alapfeltevéseiben bennfoglaltatik, maga után vonja ugyan, hogy a Larmor-tétel általános érvényét nem vehetjük bizonyosra (4. fej. 2. §); míg az oszcillátor esetében a tétel érvényességének előfeltételei teljesülnek, a mag vonzásával összetartott atom esetében ez nem áll fenn minden további nélkül. Mégsem valószínű, hogy ez a szempont az anomális Zeeman-effektus értelmezéséhez vezethet; inkább várható, hogy a kvantummechanikának a Zeeman-effektus esetében ugyanazon nehézségekkel kell megküzdenie, mint az eddigi elméletnek; *Uhlenbeck* és *Goudsmit* egy rövid közleménye⁴ azonban az anomális Zeeman-effektus problémakörében új korszakot nyitott meg. Ezek a szerzők azt a feltevést teszik, hogy az elektronnak magának mechanikai és mágneses momentuma van (melyek viszonya kétszer akkora, mint az atomok esetében), hogy tehát tulajdonképpen anomális Zeeman-effektus egyáltalán nincs is; ez a feltevés megszünteti a statisztikus súlyokkal kapcsolatos nehézségeket és kvalitatív magyarázatot szolgáltat valamennyi, a multipléttszerkezettel és a Zeeman-effektussal összefüggő jelenségre; a kérdést, vajon ily módon kvantitatív értelmezését nyerjük-e ezeknek a jelenségeknek, minden esetre csak a kvantummechanika módszereivel elvégzett pontosabb vizsgálat alapján válaszolhatjuk majd meg; úgy látszik, hogy a 4. fej. egyes eredményei ezt a reményt a későbbi kvantitatív értelmezés lehetőségére vonatkozóan a Zeeman-effektus esetében megerősítik.

Végül megkíséreltük egy ismert statisztikus probléma tárgyalását az elmélet szolgáltatja új módszerekkel. Ismeretes, hogy egy (tükröző falakkal körülzárt) üreg sajátrezgéseit az eddigi módszerek alapján kvantálva olyan eredményekre jutunk, amelyek bizonyos hasonlóságot mutatnak a fénykvantumok elméletének feltevéseivel, és amelyek lehetővé teszik a Planck-féle képlet levezetését. Az üreg-sugárzás ilyen félklasszikus tárgyalása mellett azonban, amint arra *Einstein*⁵ rámutatott, hibás értéket kapunk valamely résztérfogatban foglalt energia közepes négyzetes ingadozására. Ezt az eredményt a kvantumelmélet eddigi módszereivel szemben különösen súlyos ellenvetésnek kell tekintenünk, minthogy egyrésztől itt az elmélet már a harmonikus oszcillátor egyszerű esetében felmondja a szolgálatot, másrésztől az említett nehézség tetszőleges mechanikai rendszer, pl. egy kristályrács sajátrezgéseinek statisztikájával kapcsolatban ugyancsak fellépne. Azt találtuk, hogy az itt körvonalazott elmélet kinematikája és mechanikája alapján elvégezve a megfelelő számítást, helyes érték adódik a négyzetes ingadozásra, valamint kiadódik a Planck-féle képlet is, amit kétségtelenül az itt javasolt kvantummechanika fontos támaszának kell tekinteni.

1. fejezet. Egy szabadsági fokú rendszerek

1. § *Alapelvek.* I. Valamely **a** kvantumelméleti mennyiség — mely lehet a koordináta vagy az impulzus vagy e kettő valamely függvénye — az

$$a(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t} \quad (1)$$

mennyiségek összességével, vagy akár elhagyva a rendszerhez tartozó minden mennyiség esetében azonos (csak az n és m indexektől függő) $e^{2\pi i\nu(nm)t}$ tényezőt, az

$$a(nm) \quad (2)$$

mennyiségek összességével reprezentálható.

Beszélhetünk tehát az (egyébként végtelen) **a** „mátrix”-ról.

II. A kvantumelméleti mennyiségek összeadását és szorzását a mátrixokra érvényes műveleti szabályoknak megfelelően definiáljuk.

III. Legyen adott a mátrixok összeadása és szorzása segítségével definiált $f(x_1, x_2, \dots, x_s)$ függvény, ahol x_1, x_2, \dots, x_s kvantumelméleti mennyiségeket jelentenek. Az f függvény kétféle, az x mennyiségek valamelyike (mondjuk x_1) szerint képezett differenciálhányadosát vezetjük be:

a) Az elsőfajú differenciálhányados

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x_1 + \alpha \mathbf{1}, x_2, \dots, x_s) - f(x_1, x_2, \dots, x_s)}{\alpha} \quad (3)$$

definiálja, ahol α szám és $\mathbf{1}$ az

$$\mathbf{1} = (\delta_{nm}), \quad \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{ha } n = m, \\ 0, & \text{ha } n \neq m \end{cases}$$

képlettel definiált egységmátrix.

b) A másodfajú differenciálhányados definíciója:⁶

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(nm) = \frac{\partial D(f)}{\partial x_1(mn)}; \quad (4)$$

itt $D(f)$ az f mátrix átlósösszegét jelenti.

A jelölésben a kétféle differenciálást a törtvonal segítségével különböztetjük meg [az a) differenciálhányados esetében vastag, a b) esetben vékony törtvonalat alkalmazunk].

Az I. részben kizárólag a másodfajú differenciálás került felhasználásra, mint-hogy az lehetővé teszi a kvantummechanika variációs elvének egyszerű megfogalmazását és ezért természetesnek látszik. Némely számítás esetében azonban az elsőfajú differenciálhányados kényelmesebben alkalmazható. Általánosságban megjegyezhető, hogy a differenciálhányados bevezetése a kvantummechanikában némileg mesterkéltséget és hogy a (6) bal oldalán álló operációk képezik a klasszikus elmélet differenciálhányadosának természetes analogonját. A kanonikus egyenletek megfogalmazása szempontjából fontos megállapítani, hogy az energiafüggvény esetében a differenciálás (3) és (4) alatt definiált két faja azonossá válik.⁷

IV. A számolás a kvantumelméleti mennyiségekkel a szorzás kommutatív törvényének érvénytelensége folytán bizonyos értelemben meghatározatlan maradna, ha nem írnánk elő $\mathbf{pq} - \mathbf{qp}$ értékét.⁸ Eztér megköveteljük a

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1} \quad (5)$$

alapvető kvantummechanikai összefüggés teljesülését. Ezen összefüggés korrespondenciaszerű fizikai jelentéséről a későbbiekben még beszélünk majd. Fontosnak látszik, hogy itt rámutassunk az (5) egyenlet az egyetlen az itt tárgyalt kvantummechanika alapegyenletei között, melyben előfordul a h Planck-féle állandó. Kielegítő vonás, hogy a h állandó már itt ilyen egyszerű alakban lép fel az elmélet alaptörvényeiben; ezen kívül (5)-ből látható, hogy az új elmélet a $h=0$ határesetben átmehet a klasszikus elméletbe, amint azt fizikailag meg kell követelnünk.

Az (5) egyenletből még levezethetünk egy később fontosnak bizonyuló összefüggést.

Legyen $\mathbf{f}(\mathbf{pq})$ valamely függvénye \mathbf{p} -nek és \mathbf{q} -nak, ekkor fennáll:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{fq} - \mathbf{qf} &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{p}} \frac{h}{2\pi i}, \\ \mathbf{pf} - \mathbf{fp} &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{q}} \frac{h}{2\pi i}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Tegyük fel ugyanis, hogy ezek az egyenletek teljesülnek a φ és ψ függvényekre. Ekkor $\varphi + \psi$ -re és $\varphi \cdot \psi$ -re is teljesülnek. Ez $\varphi + \psi$ -re triviális; $\varphi \cdot \psi$ -re könnyű számítással kapjuk:

$$\begin{aligned} \varphi \cdot \psi \mathbf{q} - \mathbf{q} \varphi \psi &= \varphi (\psi \mathbf{q} - \mathbf{q} \psi) + (\varphi \mathbf{q} - \mathbf{q} \varphi) \psi = \\ &= \left(\varphi \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{p}} \psi \right) \frac{h}{2\pi i} = \frac{\partial (\varphi \psi)}{\partial \mathbf{p}} \frac{h}{2\pi i}; \end{aligned}$$

hasonlóan végezhető el a számítás $\mathbf{p} \varphi \psi - \varphi \psi \mathbf{p}$ -re.

A (6) összefüggés \mathbf{p} -re és \mathbf{q} -ra teljesül, teljesül tehát bármely \mathbf{f} függvényre is, mely formálisan \mathbf{p} és \mathbf{q} hatványai szerint kifejezhető.

2. § *Kanonikus egyenletek, energiatétel és frekvenciatétel.* Legyenek adottak a $\mathbf{H}(\mathbf{pq})$ energiafüggvény és a megfelelő

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} \quad (7)$$

kanonikus egyenletek. A

$$v(nm) + v(mk) = v(nk) \quad (8)$$

kombinációs elvből következik, hogy v előállítható a

$$v(nm) = \frac{W_n - W_m}{h} \quad (9)$$

alakban.

Vezessük be most a \mathbf{W} kvantumelméleti mennyiséget, melyet „term-mennyiség”-nek nevezünk és a

$$W(nm) = \begin{cases} W_n, & \text{ha } n=m, \\ 0, & \text{ha } n \neq m \end{cases}$$

képlettel definiálunk; \mathbf{W} tehát átlós mátrix.

Ekkor valamely \mathbf{a} kvantumelméleti mennyiségre írható:

$$\dot{\mathbf{a}} = \frac{2\pi i}{h} (\mathbf{W}\mathbf{a} - \mathbf{a}\mathbf{W}). \quad (10)$$

Az $\dot{\mathbf{a}}$ deriváltat ténylegesen (vö. I. rész) az

$$\dot{a}(nm) = 2\pi i v(nm) a(nm)$$

képlettel definiáltuk.

Az elméletnek, melyet itt kiépíteni törekszünk, alappillérei közé tartozik az energiatétel ($\mathbf{H} = \text{const}$) és a frekvenciafeltétel $\left(v(nm) = \frac{H_n - H_m}{h} ; H_n = W_n + \text{const} \right)$.

A két tétel bizonyítása céljából (6)-ot és (10)-et helyettesítsük be a (7) egyenletbe.

Ily módon kapjuk:

$$\begin{cases} \mathbf{Wq} - \mathbf{qW} = \mathbf{Hq} - \mathbf{qH} \\ \mathbf{Wp} - \mathbf{pW} = \mathbf{Hp} - \mathbf{pH} \end{cases} \quad (11)$$

vagy másképpen

$$(\mathbf{W} - \mathbf{H})\mathbf{q} - \mathbf{q}(\mathbf{W} - \mathbf{H}) = 0,$$

$$(\mathbf{W} - \mathbf{H})\mathbf{p} - \mathbf{p}(\mathbf{W} - \mathbf{H}) = 0.$$

A $\mathbf{W} - \mathbf{H}$ mennyiség eszerint \mathbf{p} -vel és \mathbf{q} -val, következésképpen \mathbf{p} és \mathbf{q} bármely függvényével s ezek között speciálisan \mathbf{H} -val is felcserélhető:

$$(\mathbf{W} - \mathbf{H})\mathbf{H} - \mathbf{H}(\mathbf{W} - \mathbf{H}) = 0.$$

Innen (10) értelmében következik:

$$\dot{\mathbf{H}} = 0. \quad (12)$$

Ezzel az energiatételt igazoltuk és látjuk, hogy \mathbf{H} átlós mátrix: $H(nm) = \delta_{nm} H_n$. A (11) összefüggésekből közvetlenül adódik a frekvenciafeltétel is:

$$q(nm)(H_n - H_m) = q(nm)(W_n - W_m), \quad (13)$$

azaz

$$\frac{H_n - H_m}{h} = v(nm). \quad (14)$$

Az előzőekben a kanonikus egyenletekből kiindulva az (5) alapegyenlet segítségével igazoltuk az energiatételt és a frekvenciatételt. Megtehetjük azonban azt is, hogy megfordítva végezzük el a bizonyítást. Tudjuk, hogy az energiatétel és a frekvenciafeltétel helyes. Ha a \mathbf{H} energiafüggvény adott, mint valamely \mathbf{P} , \mathbf{Q} változók analitikus függvénye, úgy

$$\mathbf{PQ} - \mathbf{QP} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}$$

teljesülése esetén mindenkor fennállnak a

$$\dot{\mathbf{Q}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{P}}, \quad \dot{\mathbf{P}} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{Q}} \quad (15)$$

kanonikus egyenletek. Ez közvetlenül következik abból, hogy a $\mathbf{PH} - \mathbf{HP}$, ill. a $\mathbf{HQ} - \mathbf{QH}$ mennyiség kétféleképpen értelmezhető, a (6) egyenletnek és a (10) egyenletnek megfelelően.

3. § *Kanonikus transzformációk.* A \mathbf{p} , \mathbf{q} változókat az új \mathbf{P} , \mathbf{Q} változókba transzformáló „kanonikus transzformáció”-n az előzők alapján olyan transzformációt

értünk, melyre fennáll

$$pq - qp = PQ - QP = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}; \quad (16)$$

ekkor ugyanis \mathbf{P} -re és \mathbf{Q} -ra csakúgy, mint \mathbf{p} -re és \mathbf{q} -ra fennállnak a (7), ill. (15) kanonikus egyenletek.

Az általános

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{S}\mathbf{p}\mathbf{S}^{-1}, \\ \mathbf{Q} &= \mathbf{S}\mathbf{q}\mathbf{S}^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

transzformáció, ahol \mathbf{S} tetszőleges kvantumelméleti mennyiség, eleget tesz ennek a feltételnek; szeretnénk annak a sejtésünknek kifejezést adni, hogy (17) mindjárt a *legáltalánosabb* kanonikus transzformáció. A (17) transzformáció még azzal az egyszerű tulajdonsággal rendelkezik, hogy valamely $\mathbf{f}(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ függvényre fennáll:

$$\mathbf{f}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = \mathbf{S}\mathbf{f}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\mathbf{S}^{-1},$$

ahol $\mathbf{f}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ az $\mathbf{f}(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ -ból \mathbf{P} -t \mathbf{p} -vel és \mathbf{Q} -t \mathbf{q} -val helyettesítve nyerhető, változatlanul hagyva eközben a függvény alakját. Ennek az állításnak a bizonyítása a definíciónk értelmében vett függvényekre közvetlenül következik abból a megjegyzésből, hogy a tétel a \mathbf{p} -ből és \mathbf{q} -ból képezett összegekre és szorzatokra fennáll.

A kanonikus transzformációk fontossága a következő tételen alapszik: Ha adott valamely $\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0$ értékpár, mely eleget tesz a (15) egyenletnek, úgy a $\mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q})$ energiafüggvényhez tartozó kanonikus egyenletek integrálása visszavezethető a következő problémára: Az \mathbf{S} függvényt oly módon kell meghatároznunk, hogy

$$\mathbf{p} = \mathbf{S}\mathbf{p}_0\mathbf{S}^{-1}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{S}\mathbf{q}_0\mathbf{S}^{-1} \quad (19)$$

mellett

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q}) = \mathbf{S}\mathbf{H}(\mathbf{p}_0\mathbf{q}_0)\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{W} \quad (20)$$

átlós mátrix legyen. A (20) egyenlet a Hamilton-féle parciális differenciálegyenlet analogonja; \mathbf{S} bizonyos értelemben a hatásfüggvénynek felel meg.

4. § *Perturbációelmélet.* Legyen adott a

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0(\mathbf{p}\mathbf{q}) + \lambda\mathbf{H}_1(\mathbf{p}\mathbf{q}) + \lambda^2\mathbf{H}_2(\mathbf{p}\mathbf{q}) + \dots \quad (21)$$

energiafüggvénnyel definiált mechanikai probléma.

Feltesszük, hogy a $\mathbf{H}_0(\mathbf{p}\mathbf{q})$ energiafüggvénnyel definiált mechanikai probléma megoldása ismert; legyenek tehát ismertek a $\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0$ megoldások, melyek eleget tesznek a $\mathbf{p}_0\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_0\mathbf{p}_0 = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}$ feltételnek és a $\mathbf{H}_0(\mathbf{p}_0\mathbf{q}_0) = \mathbf{W}$ mátrixot átlóssá teszik. Ezek után olyan \mathbf{S} transzformációs függvény meghatározására törekszünk, amely mellett

$$\mathbf{p} = \mathbf{S}\mathbf{p}_0\mathbf{S}^{-1}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{S}\mathbf{q}_0\mathbf{S}^{-1} \quad (22)$$

és

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q}) = \mathbf{S}\mathbf{H}(\mathbf{p}_0\mathbf{q}_0)\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{W}$$

átlós mátrixszá válik. A megoldást az

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} + \lambda\mathbf{S}_1 + \lambda^2\mathbf{S}_2 + \dots \quad (23)$$

alakban törekszünk meghatározni. Ekkor

$$S^{-1} = 1 - \lambda S_1 + \lambda^2 (S_1^2 - S_2) + \lambda^3 (\dots) + \dots \quad (24)$$

A H energiafüggvény (21) kifejezését felhasználva, a nyert kifejezést rendezhetjük λ hatványai szerint; így a

$$\left. \begin{aligned} H_0(\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0) &= W_0 \\ S_1 H_0 - H_0 S_1 + H_1 &= W_1 \\ S_2 H_0 - H_0 S_2 + H_0 S_1^2 - S_1 H_0 S_1 + S_1 H_1 - H_1 S_1 + H_2 &= W_2 \\ \dots\dots\dots \\ S_r H_0 - H_0 S_r + F_r(H_0, \dots, H_r, S_0, \dots, S_{r-1}) &= W_r \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

közelítő egyenleteket kapjuk, ahol a H_0, H_1, \dots függvényeket mindenütt a $\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0$ helyen kell vennünk.

A (25) egyenletek közül az első teljesül. A többiek sorjában megoldhatók, mégpedig teljes analógiában a klasszikus elmélettel: Először az energiakonstans rögzítése céljából képezzük mindkét oldal középértékét, s ez után a megoldás minden további nélkül felírható:

$$\left. \begin{aligned} W_r &= \bar{F}_r, \\ S_r(mn) &= \frac{F_r(mn)}{h\nu_0(mn)} (1 - \delta_{nm}), \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

ahol $\nu_0(mn)$ a perturbálatlan frekvenciák jelölésére szolgál. Ez a megoldás eleget tesz az

$$S \cdot \tilde{S}^* = 1 \quad (27)$$

feltételnek, ahol a \sim jel a sorok és oszlopok felcserélését (a transzponálást) jelzi, a csillag pedig a komplex konjugálást. Minthogy erre az összefüggésre később általánosabb szempontból visszatérünk, itt ezt csak az első közelítésre igazoljuk; az első közelítésre így hangzik ez az összefüggés:

$$S_1 + \tilde{S}_1^* = 0. \quad (28)$$

A (8) egyenlet jelentősége abban áll, hogy belőle következik a \mathbf{p}, \mathbf{q} mátrixok hermitikus jellege; (22) szerint írható:⁹

$$\mathbf{q}^* = S^* \mathbf{q}_0^* S^{*-1} = \tilde{S}^{-1} \tilde{\mathbf{q}}_0 \tilde{S} = \tilde{\mathbf{q}};$$

hasonló megállapítás tehető \mathbf{p} -re vonatkozóan is.

Első közelítésben (26)-ból — ugyanúgy, mint a klasszikus elméletben — következik:

$$W_1 = \bar{H}_1 \quad (29)$$

és

$$S_1(mn) = \frac{H_1(mn)}{h\nu_0(mn)} (1 - \delta_{mn}). \quad (30)$$

Ez a kifejezés valóban teljesíti a (28) feltételt, miután a feltevés szerint H_1 hermitikus.

Ezek után kiszámíthatjuk az energiát második közelítésben; kapjuk:

$$W_2 = \bar{H}_2 + \frac{1}{h} \sum_l' \frac{H_1(nl)H_1(nl)}{v_0(nl)}. \quad (31)$$

A szumma-jel mellett a vessző azt jelenti, hogy az eltűnő nevezőjű ($l=n$) tagok elhagyandók.

Ily módon eljárva, szukcesszíve meghatározhatjuk \mathbf{W} és \mathbf{S} sorainak valamennyi tagját. Behelyettesítve \mathbf{S} sorát (22)-be, a

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_0 + \lambda \mathbf{q}_1 + \lambda^2 \mathbf{q}_2 + \dots,$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \lambda \mathbf{p}_1 + \lambda^2 \mathbf{p}_2 + \dots$$

sorfejtéseket nyerjük, ahol az együtthatók ismertek. Az első közelítés pl. így hangzik:

$$\mathbf{q}_1 = \mathbf{S}_1 \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_0 \mathbf{S}_1,$$

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{S}_1 \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_0 \mathbf{S}_1,$$

vagy részletesen:

$$\begin{aligned} q_1(mn) &= \frac{1}{h} \sum_k' \left(\frac{H_1(mk)q_0(kn)}{v_0(mk)} - \frac{q_0(mk)H_1(kn)}{v_0(kn)} \right), \\ p_1(mn) &= \frac{1}{h} \sum_k' \left(\frac{H_1(mk)p_0(kn)}{v_0(mk)} - \frac{p_0(mk)H_1(kn)}{v_0(kn)} \right). \end{aligned} \quad (32)$$

A (32) képletek megegyeznek a Kramers-féle diszperzióelmélet¹⁰ eredményeivel abban a határesetben, amikor a külső tér frekvenciája végtelen kicsinnyé válik; ez a lehetőség az egyébként korrespondencia-megfontolások alapján nyert képletek egyszerű leszámaztatására nézetünk szerint erősen mellette szól az elmélet helyességének, melynek kiépítésére ebben a dolgozatban kísérletet teszünk. A (31) képletet Born¹¹ oly módon nyerte, hogy a megfelelő klasszikus képleteknek új értelmezést adott. A (32) egyenletek $m=n$ mellett a közönséges szórt fényre vonatkozó Kramers-féle képleteknek, ha pedig $m \neq n$, úgy „a kombinációs frekvenciáknak megfelelő szórt fényre” Kramerstől és Heisenbergtől¹² megadott képleteknek felelnek meg. Az utóbbi kifejezéseket Pauli¹³ a Hg külső elektromos terekben fellépő (egyébként „tiltott”) átmeneteinek megfelelő intenzitások számítására használta fel. Az általános diszperziós képletek leszámaztatásához (mikor is a külső tér frekvenciája nem tűnik el) még általánosabb megfontolásokra van szükség az időben változó külső terek hatásáról; most ezekre térünk rá.

5. §. Az időt explicite tartalmazó „energiafüggvénnyel” jellemzett rendszerek. Az időtől explicite függő külső erők kvantummechanikai hatásának tárgyalása azért látszik számunkra különösen érdekesnek, mert ezen problémák esetében napvilágra kerül néhány, a kvantumelméleti és a klasszikus mechanika között fennálló jellegzetes különbség. Az időben változó külső erők hatásának problémáját úgy kell felfognunk, mint két rendszer kölcsönhatása problémájának határesetét, mikor is a kölcsönhatás befolyása az egyik rendszerre (ezt nevezzük A -nak) oly csekély,

hogy a másik (B) rendszerre gyakorolt hatásokat ezen befolyás nem változtatja meg. Vegyük tehát most szemügyre a kvantummechanika nézőpontjából az A , B rendszerek között fennálló csatolást; a Hamilton-függvény legyen három tag: \mathbf{H}_A , $\lambda \mathbf{H}_B$ és $\varepsilon \lambda \mathbf{H}_{AB}$ összege (itt λ egyelőre tetszőleges paraméter, ε pedig egy kicsiny mennyiség). Az A rendszer legyen ismert. A B rendszer mozgásának kiszámítására a klasszikus elméletben elégséges, ha B koordinátáira felállítjuk [a $\lambda(\mathbf{H}_B + \varepsilon \mathbf{H}_{AB})$ Hamilton-függvényből kiindulva] a mozgásegyenleteket; itt A koordinátái helyére a megfelelő megoldásokat helyettesítjük be (az A rendszer jellemző állandók tényleges, meghatározott értékei mellett), melyek a koordinátákat az idő függvényeként adják meg. Éppen ezen keresztül lép fel a visszahatás elhanyagolásakor az A -t jellemző állandók mellett az idő mint új változó B perturbációs problémájában. A kvantummechanikában ugyanilyen viszonyok állnak fenn, ha az elsőrendű perturbációkra (azaz B koordinátáinak, impulzusainak stb. kifejezésében az ε -nal arányos tagokra) szorítkozunk. Másként áll azonban a dolog a magasabbrendű perturbációk esetében. A magasabbrendű perturbációk kiszámításakor ugyanis olyan mennyiségek szorzatai lépnek fel, melyek között több is tartalmazhatja impliciten A koordinátáit. Ez azonban a szorzat képzésének kvantummechanikai szabályai szerint azt jelenti, hogy semmiképpen sem elegendő, ha „a külső erőket mint az idő függvényeit” az A -ra jellemző állandók *meghatározott* értékei mellett ismerjük, hanem ezeket a külső erőket ismernünk kell az állandók *valamennyi* értékére. Ezzel azonban, úgy látszik, a külső erők fogalma elveszíti eredeti értelmét. E nehézség megoldását nézetünk szerint az a megjegyzés adja meg, hogy a visszahatás önmagában $\lambda \varepsilon^2$ nagyságrendű, B koordinátáit tartalmazó tagokra vezet, hogy tehát a visszahatás elhanyagolásának és ezzel egyidejűleg a B -re vonatkozó, ε^2 nagyságrendű tagok kiszámításának csak akkor van értelme, ha λ is igen kicsinynek tekinthető, azaz fizikailag, ha az A -ra jellemző mennyiségeknek a megfelelő B -beli mennyiségek nagyságrendjébe eső megváltoztatása A -nak B -re gyakorolt hatását nem változtatná meg észrevehetően. Ebben a közelítésben azonban a kvantummechanikai szorzat képzése és így az ε -ban magasabbrendű perturbációk kiszámítása megint lehetséges, mégpedig a szorzat képzésének szabályai egyszerűen a klasszikus szorzásaira redukálódnak, minthogy a \mathbf{H}_{AB} -ban szereplő koordináták, amplitúdók és frekvenciák ebben a közelítésben nem függenek az A -ra jellemző állandóktól. Ebben az értelemben pl. valamely erős váltakozó elektromos tér hatása az atomra teljes mértékben kiszámítható mint valamely „külső tér” hatása, elhanyagolva a visszahatást, minthogy a tér energiája az atoméhoz viszonyítva végtelennek tekinthető. Valamely α -rész hatását az atom elektronjaira az α -rész energiájának viszonylag nagy értéke folytán ugyancsak felfoghatnánk mint „külső erőt”, akárcsak a klasszikus elméletben, és az elektronokra ható erőt mint az idő függvényét előállító Fourier-sor ebben a közelítésben ugyancsak a klasszikus elméletből lenne átvehető. Azonban valamely atom keltette erők hatása egy másik atomra sohasem értelmezhető külső erők hatásaként — illetőleg csak az elsőrendű tagokban, hol az ilyen értelmezés mindig lehetséges, — minthogy a magasabbrendű tagok esetében a visszahatás elhanyagolásával hibás eredményekre jutnánk.

Megfontolásaink eredményét a következőkben foglaljuk össze: Bizonyos feltételek teljesülése esetén van értelme, hogy akárcsak a klasszikus elméletben, meghatározott, időben változó erőknek az atomra kifejtett hatásáról beszéljünk. Ebben az esetben az explicite fellépő idővel a klasszikus elmélet szabályai szerint kell számolnunk. Legyen pl. a külső erőtér periodikus; frekvenciája legyen ν_0 . Ekkor a

q koordináta általános eleme a következő alakú:

$$q(mn, \tau) e^{2\pi i [v(mn) + \tau v_0] t}, \quad (33)$$

q^2 általános eleme pedig

$$\sum_{k, \tau'} q(mk, \tau - \tau') q(kn, \tau') e^{2\pi i [v(mn) + \tau v_0] t}. \quad (34)$$

Az időben változó külső erők esete ennél fogva nézetünk szerint figyelemre méltó példát szolgáltat a correspondenciaszerű átmenetre a kvantumelméleti kinematikáról a klasszikusba.

Ha csupán a külső erőkben elsőrendű hatások számításáról van szó, úgy a következő számításokkal nyert eredmények olyankor is helyesek maradnak, ha a korábban említett feltételek nem teljesülnek. Mindez pontos analógiában áll a klasszikus elmélettel.

A fent közölt megfontolások szerint az olyan rendszerek matematikai tárgyalása, amelyek esetében az idő explicite fellép, (az említett feltételek teljesülése esetén) egyszerűen a megfelelő klasszikus módszerekkel analógiában végezhető el. Tegyük fel ismét, hogy a külső erő az időben periodikus, éspedig v_0 frekvenciával; a Hamilton-függvény legyen¹⁴

$$H = H(p_k, q_k, \cos 2\pi v_0 t). \quad (35)$$

Vezessünk be most egy új szabadsági fokot, az ennek megfelelő változókat q' , p' jelölje. Vegyük szemügyre az időt explicite nem tartalmazó

$$H' = H(p_k, q_k; q') + 2\pi v_0 \sqrt{1 - q'^2} p' \quad (36)$$

Hamilton-függvénnyel definiált új problémát. A p_k , q_k változókra az eddigi kanonikus egyenleteket kapjuk, csak $\cos 2\pi v_0 t$ helyett mindenütt q' áll. Az újonnan fellépő egyenletek a következő alakúak:

$$\left. \begin{aligned} \dot{q}' &= \frac{\partial H'}{\partial p'} = 2\pi v_0 \sqrt{1 - q'^2}, \\ \dot{p}' &= -\frac{\partial H'}{\partial q'} = -\frac{\partial H}{\partial q'} + 2\pi v_0 \frac{q'}{\sqrt{1 - q'^2}} p'. \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

Az első egyenlet azt mondja ki, hogy q' (eltekintve az időskála kezdőpontja önkényes megválasztásának lehetőségétől) $\cos 2\pi v_0 t$ -vel lesz egyenlő, úgyhogy a p_k , q_k változókra vonatkozó kanonikus egyenletek ugyanolyan alakúak, mint az előbbi probléma esetében: a (37) egyenletek közül a második p' -t határozza meg. A (36) Hamilton-függvény segítségével a (35) problémát valóban visszavezettük tehát az egyébként tárgyalt esetekre.

Bennünket mindenek előtt az a kérdés érdekel, milyen változtatásokat kell eszközölnünk a (25) perturbációs képletben, ha az idő a H_1 , H_2 , ... függvényekben explicite fellép, H_0 -ban, azonban *nem*. Egyszerű megfontolás mutatja, hogy az esztünkre érvényes perturbációs képletek a korábbi formulákból oly módon nyerhetők, hogy mindenüvé, ahol korábban a $H_0 S_r - S_r H_0$ kifejezés lépett fel, most $H_0 S_r - S_r H_0 + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial S_r}{\partial t}$ -t írunk. (A H_0 függvény csak ebben a kifejezésben fordul elő.)

Az új perturbációs képletek az első néhány rendben:

$$\left. \begin{aligned} H_0(\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0) &= W_0, \\ S_1 H_0 - H_0 S_1 - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial S_1}{\partial t} + H_1 &= W_1, \\ S_2 H_0 - H_0 S_2 - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial S_2}{\partial t} + \left(H_0 S_1 - S_1 H_0 + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial S_1}{\partial t} \right) S_1 & \\ + S_1 H_1 - H_1 S_1 + H_2 &= W_2, \\ \dots\dots\dots \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

Szeretnénk kifejezést adni annak a sejtésünknek, hogy a (38) képletek akkor is érvényesek, ha a feltevés, mely szerint a külső erők az időben periodikusak, nem helytálló — habár ezt a feltevést e képletek levezetésekor felhasználtuk.

A (38) képletek közül az első rendben kapottak, melyek még akkor is helyesek maradnak, ha a „külső erők”-re vonatkozó feltevések nem teljesülnek, (22)-vel, ill. az abból nyert

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_0 + \lambda (\mathbf{S}_1 \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_0 \mathbf{S}_1),$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \lambda (\mathbf{S}_1 \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_0 \mathbf{S}_1)$$

összefüggésekkel együtt általánosságban megválaszolják a diszperzióelmélet kérdéseit. Valóban, ha

$$H_1 = E e q_0 \cos 2\pi \nu_0 t,$$

úgy kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} H_1(mn, 1) &= \frac{Ee}{2} q_0(mn), & H_1(mn, -1) &= \frac{Ee}{2} q_0(mn), \\ S_1(mn, 1) &= \frac{Ee}{2h} \frac{q_0(mn)}{\nu_0(mn) + \nu_0}, & S_1(mn, -1) &= \frac{Ee}{2h} \frac{q_0(mn)}{\nu_0(mn) - \nu_0}. \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

Innen következik [vö. (22)]:

$$q_1(mn, +1) = \frac{Ee}{2h} \sum_k \left(\frac{q_0(mk) q_0(kn)}{\nu_0(mk) + \nu_0} - \frac{q_0(mk) q_0(kn)}{\nu_0(kn) + \nu_0} \right). \quad (40)$$

Ha feltesszük, hogy Descartes-koordinátákkal dolgozunk, azaz $p = m\dot{q}$, úgy nyerjük:

$$q_1(mn, 1) = \frac{Ee}{2h \cdot 2\pi i m} \sum_k \frac{q_0(mk) p_0(kn) - p_0(mk) q_0(kn)}{(\nu_0(mk) + \nu_0)(\nu_0(kn) + \nu_0)}, \quad (41)$$

s ugyanúgy:

$$q_1(mn, -1) = \frac{Ee}{2h \cdot 2\pi i m} \sum_k \frac{q_0(mk) p_0(kn) - p_0(mk) q_0(kn)}{(\nu_0(mk) - \nu_0)(\nu_0(kn) - \nu_0)}. \quad (42)$$

A (40), (41), (42) egyenletek megegyeznek a Kramers-féle diszperzióelmélet képleteivel¹⁵. Különösen érdekesnek látszik még a beeső fény igen nagy frekvenciájának

esete: $|v_0| \gg |v_0(mk)|$, ill. $|v_0(kn)|$. Ekkor első közelítésben kapjuk:

$$\mathbf{q}_1 = -\frac{Ee}{h2\pi i v_0^2 m} (\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_0 \mathbf{p}_0) \cos 2\pi v_0 t$$

vagy felhasználva (5)-öt:

$$\mathbf{q}_1 = +\frac{Ee}{4\pi^2 m v_0^2} \cos 2\pi v_0 t. \quad (43)$$

Ez az eredmény a következőket jelenti: végeredményképpen éppen az (5) kvantumelméleti felcserélési összefüggés eredményezi azt, hogy elég nagy frekvenciákra az elektron fényszórásakor szabad elektronként viselkedik. A $v_0(mn) + v_0$ frekvenciához tartozó szórt fény $m \neq n$ esetén eltűnik, a v_0 rezgésszámú szórt fény intenzitása megegyezik a szabad elektronon fellépő szórás esetében várható intenzitással.¹⁶

2. fejezet. Tetszőlegesen sok szabadsági fokú rendszerek elméletének alapjai

1. §. *A kanonikus mozgásegyenletek; perturbációelmélet nemelfajult rendszerek esetében.* Ha a szabadsági fokok száma $f > 1$, a kvantumelméleti mennyiségek reprezentálására kézenfekvő kétdimenziós mátrixok helyett $2f$ -dimenziós mátrixokat választani, megfelelően annak, hogy a klasszikus J -térben a stacionárius állapotok serege $2f$ -dimenziós:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_k &= (q_k(n_1, \dots, n_f, m_1, \dots, m_f)), \\ \mathbf{p}_k &= (p_k(n_1, \dots, n_f, m_1, \dots, m_f)). \end{aligned} \quad (1)$$

Mindazonáltal ez az előállítás — ha bizonyos körülmények között igen kényelmes és áttekinthető is — egyáltalán nem szükségszerű. A dinamikai alapegyenletek több szabadsági fok esetében is *mátrixegyenletek* alakját öltik; a mátrixok azonban — éppúgy, mint eddig — két dimenzióban is felírhatók. Már egy szabadsági fok esetében is megmutatkozott ugyanis, hogy a stacionárius állapotok *sorrendje*, mely a mátrixok sorainak elrendezésében jut kifejezésre, (ellentétben az eddigi elmélettel) tetszőleges és azt a rendszer semmilyen belső tulajdonsága nem határozza meg. Ez a megjegyzés minden további nélkül átvihető a többdimenziós mátrixokra; tetszőleges átrendezést eszközölhetünk, speciálisan a $2f$ -dimenziós mátrixokat kétdimenziósakká is átrendezhetjük. Az összeadás és a szorzás, valamint az időderiválás alapul vett definíciói ugyanis nyilvánvalóan teljesen függetlenek az n_1, n_2, \dots, n_f index-rendszerek *sorrendjére* vonatkozó bármiféle *relációtól*. (Az n_1, n_2, \dots, n_f index-rendszerek *egyenként* véve az *állapotokat* jelzik, *páronként* véve pedig az *átmeneteket*.)

Ezek után az is világos, hogy a mátrixanalízis általános szabályai, amint azokat az I. rész I. fejj. és ezen munka I. fejj. magában foglalja, minden további nélkül a több szabadsági fokú rendszerek elméletében is alkalmazhatók. A mozgásegyenletek levezetése az I. rész. I. fejj. variációs elvéből ugyanúgy közvetlenül átvehető, úgyhogy mindjárt írhatjuk:

$$\mathbf{q}_k = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}_k}, \quad \dot{\mathbf{p}}_k = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}_k}. \quad (2)$$

Lényegesen új, az egy szabadsági fokú rendszerek elméletén túlmenő feltevésként járulnak ezekhez a \mathbf{p}_k -k és a \mathbf{q}_k -k általános felcserélési összefüggései. Ugyanúgy

mint egy szabadsági fok esetén, a számolás a kvantumelméleti mennyiségekkel bizonyos mértékig meghatározatlan maradna ugyanis, ha nem adnánk meg a „cserelációkat”.

Az 1. fej. (5) kézenfekvő általánosításaként a következő egyenletek kínálkoznak:

$$\left. \begin{aligned} p_k q_l - q_l p_k &= \frac{h}{2\pi i} \delta_{kl}, \\ p_k p_l - p_l p_k &= 0, \\ q_k q_l - q_l q_k &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Jelentse H a szimmetrizált energiafüggvényt. Ekkor ezen összefüggések alapján (2) a

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \quad (2')$$

egyenletekkel helyettesíthető. Ezekből az összefüggésekből,¹⁷ mint fent ezen munka 1. fejezetében, következik továbbá:

$$\left. \begin{aligned} p_k f(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f) - f p_k &= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial f}{\partial q_k}, \\ f q_k - q_k f &= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial f}{\partial p_k}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Az energiatétel és a frekvenciafeltétel ezek után (2') és (4) alapján az 1. fej. gondolatmenetének mintájára igazolható. Ugyanígy (3) és (4) alapján meg lehet mutatni, hogy amennyiben a P_k , Q_k változók valamely rendszere teljesíti a (3) összefüggéseket és az energiafüggvény adott mint a P_k -k és a Q_k -k analitikus függvénye, úgy fennállnak a (2') kanonikus mozgásegyenletek.

A p_k , q_k változók valamely transzformációját a P_k , Q_k új változókba akkor nevezzük „kanonikus”-nak, ha az változatlanul hagyja a (3) összefüggéseket.

Az ilyen transzformációk egy igen általános osztályát adják meg ismét a

$$\left. \begin{aligned} P_k &= S p_k S^{-1} \\ Q_k &= S q_k S^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

képletek. Ez a transzformáció megint csak rendelkezik azzal a tulajdonsággal is, hogy a tetszőleges $f(PQ)$ függvényt az

$$f(P_1, \dots, P_f, Q_1, \dots, Q_f) = S f(p_1, \dots, p_f, q_1, \dots, q_f) S^{-1} \quad (6)$$

függvénybe viszi át. Ha ismeretes a változók valamely $p_1^0, \dots, p_f^0, q_1^0, \dots, q_f^0$ rendszere, mely eleget tesz a (3) egyenleteknek, úgy a (2) integrálásának problémája ismét a következő problémára redukálódik: Meghatározandó a

$$\left. \begin{aligned} p_k &= S p_k^0 S^{-1}, \\ q_k &= S q_k^0 S^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (5a)$$

egyenleteket kielégítő S függvény, mely a

$$H(pq) = SH(p^0q^0)S^{-1} = W \quad (7)$$

mátrixot átlóssá teszi.

A (7) egyenlet ismét analogonja a Hamilton-féle parciális differenciálegyenletnek.

A (3) egyenletek (2)-vel együtt nyilvánvalóan túl sok követelményt jelentenének a p_k -kra és q_k -kra, ha mindezek az egyenletek *függetlenek* volnának egymástól. Kétségtelenül érdekes matematikai feladat volna a (3) egyenleteket minimális számú független és ellentmondásmentes feltevésből levezetni; mindazonáltal itt nem kívánunk ezzel a kérdéssel foglalkozni. Megelégszünk azzal a megjegyzéssel, hogy

$$\frac{d}{dt} \sum_k (p_k q_k - q_k p_k) = 0$$

fennállására általánosságban következtethetünk az (1) mozgásegyenletekből. Meg kívánjuk viszont mutatni, hogy a (3) egyenletek, a (2) mozgásegyenletekkel, ill. az azokkal egyenértékű (7) követelménnyel együtt, általában *kielégíthetők* (természetesen szinguláris kivételektől eltekintve).

Ennek bizonyítása a perturbációszámítás tetszőleges számú szabadsági fokra való, az 1. fej. 4. §-ban megadott általánosításával kapcsolatban adható meg. Gondoljuk el, hogy a $H(pq)$ energiafüggvényt a

$$H = H_0(pq) + \lambda H_1(pq) + \lambda^2 H_2(pq) + \dots \quad (8)$$

alakban írtuk fel, ahol

$$H_0(pq) = \sum_{k=1}^f H^{(k)}(p_k q_k).$$

Ha $\lambda=0$, f számú kölcsönhatásmentes, egy szabadsági fokú rendszerrel van dolgunk; az f számú

$$H = H^{(k)}(p_k q_k)$$

feladat megoldásai legyenek

$$q_k = q_k^0, \quad p_k = p_k^0,$$

ahol q_k^0 , p_k^0 kétdimenziós mátrixok:

$$q_k^0: (q_k^0(nm)); \quad p_k^0: (p_k^0(nm)). \quad (10)$$

Ha ezt az f számú kölcsönhatásmentes rendszert formálisan egyetlen, f szabadsági fokú rendszernek tekintjük, úgy a q_k^0 -kat és p_k^0 -kat $2f$ -dimenziós mátrixok alakjában kell előállítanunk:

$$\left. \begin{aligned} q_k^0 &= (q_k^0(n_1, \dots, n_f; m_1, \dots, m_f)), \\ p_k^0 &= (p_k^0(n_1, \dots, n_f; m_1, \dots, m_f)) \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

melyekre fennáll:

$$\begin{aligned} q_k^0(n_1, \dots, n_f; m_1, \dots, m_f) &= \delta_k q_k^0(n_k m_k) \\ p_k^0(n_1, \dots, n_f; m_1, \dots, m_f) &= \delta_k p_k^0(n_k m_k); \end{aligned}$$

itt $\delta_k=1$, ha $j=k$ kivételével minden j -re $n_j=m_j$, és $\delta_k=0$, ha valamely j -re ($\neq k$)

$n_j = m_j$ nem teljesül. Innen látható: Először is a

$$\mathbf{p}_k^0 \mathbf{q}_k^0 - \mathbf{q}_k^0 \mathbf{p}_k^0 = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1} \quad (12)$$

egyenletek, melyek eredetileg a (10) *kétdimenziós* mátrixokra álltak fenn, a (11) *2f-dimenziós* mátrixokra is érvényesek maradnak. Másodsor, kiadódnak a

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{p}_k^0 \mathbf{q}_l^0 - \mathbf{q}_l^0 \mathbf{p}_k^0 &= 0 & (l \neq k), \\ \mathbf{p}_k^0 \mathbf{p}_l^0 - \mathbf{p}_l^0 \mathbf{p}_k^0 &= \mathbf{q}_k^0 \mathbf{q}_l^0 - \mathbf{q}_l^0 \mathbf{q}_k^0 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

feltételek. Eszerint ha $\lambda = 0$, a (3) egyenletek valóban mind teljesülnek. Most megmutatjuk, hogy \mathbf{p} és \mathbf{q} meghatározható oly módon, hogy a (3) összefüggések a magasabb közelítésekre is kielégülnek és ezzel egyidejűleg $\mathbf{H} = \mathbf{W}$ is teljesül. Most is fel kell tennünk, hogy *nem-elfajult* \mathbf{H}_0 rendszert választottunk, azaz $\mathbf{q} = \mathbf{q}^0$ és $\mathbf{p} = \mathbf{p}^0$ behelyettesítésekor \mathbf{H}_0 átlós elemei között nem lép fel két egyenlő elem. Ebben az esetben ismét az (5a) feltevessel kell próbálkoznunk:

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{S} \mathbf{q}_k^0 \mathbf{S}^{-1}; \quad \mathbf{p}_k = \mathbf{S} \mathbf{p}_k^0 \mathbf{S}^{-1} \quad (14)$$

ahol az

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} + \lambda \mathbf{S}_1 + \lambda^2 \mathbf{S}_2 + \dots$$

függvényt úgy kell meghatározni, hogy a $\mathbf{H} = \mathbf{W}$ egyenlet teljesüljön. A (3) egyenletek ekkor ugyancsak mind teljesülnek, minthogy azokat (14) a (12), (13) egyenletekbe transzformálja. Ezzel a kívánt bizonyítást megadtuk.

A (3) egyenletek invariánsak a \mathbf{q}_k -k és \mathbf{p}_k -k lineáris ortogonális transzformációval szemben. Legyen ugyanis

$$\begin{aligned} \mathbf{q}'_k &= \sum_l a_{kl} \mathbf{q}_l, \\ \mathbf{p}'_k &= \sum_l a_{kl} \mathbf{p}_l, \end{aligned} \quad \sum_l a_{kl} a_{jl} = \delta_{kj},$$

akkor

$$\mathbf{p}'_k \mathbf{q}'_l - \mathbf{q}'_l \mathbf{p}'_k = \sum_{hj} a_{kh} a_{lj} (\mathbf{p}_h \mathbf{q}_j - \mathbf{q}_j \mathbf{p}_h) = \delta_{kl} \frac{h}{2\pi i};$$

hasonlóképpen a többi összefüggés is teljesül. Ha tehát a (3) feltételek teljesülését egy Descartes-koordinátarendszerben megköveteljük, úgy azok bármely más Descartes-koordinátarendszerben is érvényesek.

Mintegy függetlenül hadd utaljunk itt még arra, hogy a klasszikus mechanika egy jól ismert tétele a (3) összefüggések alapján az új elméletben minden további nélkül átvihető. Legyen

$$\mathbf{H} = \mathbf{E}_{\text{kin}} + \mathbf{E}_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{\mathbf{p}_k^2}{m_k} + \mathbf{E}_{\text{pot}}; \quad (15)$$

feltesszük, hogy \mathbf{E}_{pot} a koordináták n -edfokú homogén függvénye. Ekkor (3) értelmében írható:

$$\mathbf{E}_{\text{pot}} = \frac{1}{n} \sum_k \frac{\partial \mathbf{E}_{\text{pot}}}{\partial \mathbf{q}_k} \mathbf{q}_k \quad (16)$$

és

$$\frac{d}{dt} \sum_k \mathbf{p}_k \mathbf{q}_k = \sum_k (\dot{\mathbf{p}}_k \mathbf{q}_k + \mathbf{p}_k \dot{\mathbf{q}}_k) = 2\mathbf{E}_{\text{kin}} - n\mathbf{E}_{\text{pot}},$$

a középértékekre kapjuk tehát:

$$\bar{\mathbf{E}}_{\text{kin}} = \frac{n}{2} \mathbf{E}_{\text{pot}}. \quad (17)$$

Pl. $n=2$ (harmonikus rezgések) esetén $\bar{\mathbf{E}}_{\text{kin}} = \bar{\mathbf{E}}_{\text{pot}}$, $n=-1$ (Coulomb-erők) esetén pedig $\bar{\mathbf{E}}_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}\bar{\mathbf{E}}_{\text{pot}}$.

2. §. *Elfajult rendszerek.* Vegyük most szemügyre az elfajult rendszereket. Ha megengedjük, hogy a $v(nm)$ frekvenciák közül némelyek eltűnjenek (az egyszerűség kedvéért a mátrixokat két dimenzióban felírva gondoljuk el), az *energia állandóságát* kifejező $\dot{\mathbf{H}}=0$ egyenlet akkor is levezethető a mozgásegyenletekből s a (3) felcserélési szabályokból az I.-ben és itt közölt megfontolások segítségével. De a $\dot{\mathbf{H}}=0$ összefüggésből már nem következik szükségképpen, hogy \mathbf{H} átlós mátrix, és így a frekvenciatétel bizonyítása nem végezhető el. Eszerint elfajult rendszerek esetében a mozgásegyenletek s a (3) feltételek önmagukban *nem elégségesek* a rendszer tulajdonságainak rögzítésére, s így szükséges, hogy az alapegyenleteket *élesebbé* tegyük. Kézenfekvő feltenni, hogy ezt az élesítést a következőképpen kell megfogalmazni: *Alapegyenletekként általánosságban a felcserélési összefüggéseket és a*

$$\mathbf{H} = \mathbf{W} = \text{átlós mátrix} \quad (18)$$

követelményt kell választanunk.

Ez a követelmény a frekvenciafeltétel érvényességét nyilvánvalóan elfajult rendszerekre is biztosítja. Igen valószínű, hogy ez által (szinguláris esetektől eltekintve) a \mathbf{W} energia is mindenkor egyértelműen meg van határozva. A \mathbf{q}_k koordináták ezzel szemben *nem* egyértelműen meghatározottak. Ha rendelkezésre áll $\mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q}) = \mathbf{W}$ valamely \mathbf{p}_k , \mathbf{q}_k megoldása, megkísérrelhetjük, hogy új megoldásokat képezzünk a

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{p}' &= \mathbf{S}\mathbf{p}\mathbf{S}^{-1}, \\ \mathbf{q}' &= \mathbf{S}\mathbf{q}\mathbf{S}^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

képletek segítségével. Ekkor

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}'\mathbf{q}') = \mathbf{W}' = \mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}^{-1},$$

s a $\mathbf{W}' = \mathbf{W}$ követelményből $\mathbf{W}\mathbf{S} - \mathbf{S}\mathbf{W} = \dot{\mathbf{S}} \frac{\hbar}{2\pi i} = 0$ adódik, azaz

$$\mathbf{S} = \text{const.} \quad (20)$$

Foglalkozunk először ezen eredmény jelentőségével a nem-elfajult rendszerek esetében. Itt (20) értelmében \mathbf{S} -nek átlós mátrixnak kell lennie, és a (19) egyenletekből kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{p}'(nm) &= \mathbf{p}(nm) \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m^{-1}, \\ \mathbf{q}'(nm) &= \mathbf{p}(nm) \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (19')$$

ahol $\mathbf{S}(nm)$ helyett röviden \mathbf{S}_n -et írtunk.

A megoldás itt kifejezésre jutott meghatározatlanságát lényegesen csökkenti a követelmény, hogy az új \mathbf{p}' , \mathbf{q}' megoldások is „reális”, hermitikus mátrixokkal leírt mozgásnak feleljenek meg; eszerint kapjuk:

$$|S_n S_m^{-1}| = |S_m S_n^{-1}|$$

vagy

$$|S_n| = |S_m|. \quad (21)$$

Az itt napvilágra került meghatározatlanság tehát a *fázisállandók* önkényes választásának lehetőségét jelenti; itt általános bizonyítást kapjuk a már I.-ben kimondott sejtésünknek, hogy minden problémában minden egyes állapotra nézve egy-egy φ_n fázis meghatározatlan marad. A (19') képlet is mutatja, miképpen lépnek fel ezek a fázisok a \mathbf{p} , \mathbf{q} mátrixok elemeiben. Az I. részben annak a sejtésünknek adtunk továbbá kifejezést, hogy a fázis most leírt önkényes választásán kívül nem-elfajult rendszerek esetében más többértelműség nem várható. Az I. fejez. 4. §-ban tárgyalt perturbációs számítás során az S_n „periodikus” mátrixok mindegyikéhez nyilvánvalóan hozzáadható egy-egy állandó mátrix. Ez azonban természetesen nem jelenti azt, hogy minden közelítésben új határozatlanul maradó fázisok lépnek fel. Könnyen felismerhetjük, hogy ezt a lehetőséget kihasználva sem találhatnánk általánosabb \mathbf{p} , \mathbf{q} megoldásokat, amennyiben kezdettől fogva feltételeztük \mathbf{p}^0 , \mathbf{q}^0 fázisainak határozatlanságát.

Térjünk át most az elfajult rendszerekre. Ekkor (20)-ból nem következik többé, hogy \mathbf{S} átlós mátrix, és (19) valóban lehetőséget nyújt arra, hogy a \mathbf{p} , \mathbf{q} megoldástól lényegesen különböző \mathbf{p}' , \mathbf{q}' megoldásokat nyerjünk. Úgy látszik, hogy ez a többértelműség a dolog természetében rejlik. Az elfajult rendszerekre nyilvánvalóan egy bizonyos *labilitás* jellemző, melynek folytán tetszőleges kicsiny perturbációk a koordináták véges megváltozását eredményezhetnek, és amely matematikailag abban jut kifejezésre, hogy a teljesen perturbációmentes esetben a dinamikai egyenletek megoldása részlegesen meghatározatlan marad. Természetesen valamely valószínűségi atom esetében a rendszer fizikai tulajdonságait, speciálisan az átmeneti valószínűségeket meghatározó koordinátákat külső perturbációk vagy a rendszer előléte egyértelműen rögzítik.

Vizsgáljuk most tetszőleges perturbációk hatását az elfajult rendszerre. Legyen tehát

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}\mathbf{q}) = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1 + \lambda^2 \mathbf{H}_2 + \dots \quad (22)$$

és legyen \mathbf{p}^0 , \mathbf{q}^0 a perturbálatlan probléma tetszőleges, de rögzített megoldása:

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{p}_0\mathbf{q}_0) = \mathbf{W}_0. \quad (23)$$

Ha

$$\mathbf{p} = \mathbf{S}\mathbf{p}^0\mathbf{S}^{-1},$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{S}\mathbf{q}^0\mathbf{S}^{-1},$$

ahol

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_0(\mathbf{1} + \lambda \mathbf{S}_1 + \lambda^2 \mathbf{S}_2 + \dots), \quad (24)$$

$$\mathbf{S}^{-1} = (\mathbf{1} - \lambda(\mathbf{S}_1 + \lambda \mathbf{S}_2 \dots) + \lambda^2 \dots) \mathbf{S}_0^{-1}, \quad (25)$$

úgy — a $\mathbf{p}^0, \mathbf{q}^0$ argumentumokat $\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1, \dots$ felírásánál mellőzve — kapjuk:

$$\mathbf{S}_0 \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_0^{-1} = \mathbf{W}_0, \quad (26)$$

$$\mathbf{S}_0 \mathbf{S}_1 \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_0^{-1} - \mathbf{S}_0 \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_0^{-1} + \mathbf{S}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{S}_0^{-1} = \mathbf{W}_1, \quad (27)$$

$$\mathbf{S}_0 \mathbf{S}_2 \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_0^{-1} - \mathbf{S}_0 \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_0^{-1} + \mathbf{S}_0 \mathbf{F}_2(\mathbf{H}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2; \mathbf{S}_1) \mathbf{S}_0^{-1} = \mathbf{W}_2, \quad (28)$$

.....

$$\begin{aligned} & \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_r \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_0^{-1} - \mathbf{S}_0 \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_r \mathbf{S}_0^{-1} \\ & + \mathbf{S}_0 \mathbf{F}_r(\mathbf{H}_0 \mathbf{H}_1 \dots \mathbf{H}_r, \mathbf{S}_1 \dots \mathbf{S}_{r-1}) \mathbf{S}_0^{-1} = \mathbf{W}_r. \end{aligned} \quad (29)$$

Majdnem az 1. fej. (25) egyenleteit kaptuk meg újra, a különbség csak annyi, hogy a bal oldal mindenütt előlről \mathbf{S}_0 -al és hátulról \mathbf{S}_0^{-1} -gyel van megszorozva.

A (26) egyenletet fent már diszkutáltuk; $\mathbf{S}_0(nm)$ zérussal egyenlő $v_0(nm)$ el nem tűnő értékeire. Az \mathbf{S}_0 -ban fennmaradó önkényt lehetőség szerint arra kell felhasználnunk, hogy a következő egyenletet megoldhatóvá tegyük. Temészetesen nem várható $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0$ bármely megoldásától, így speciálisan a kiválasztott $\mathbf{p}^0, \mathbf{q}^0$ megoldástól sem, hogy az megegyezzek a (22) probléma \mathbf{p}, \mathbf{q} megoldásának $\lambda = 0$ határesetével. Az \mathbf{S}_0 függvény arra szolgál, hogy a $\mathbf{p}^0, \mathbf{q}^0$ megoldásból előállítsa az elfajult probléma azon megoldását, amely rendelkezik a kívánt tulajdonsággal.

A (27) egyenlet átirható az

$$\mathbf{S}_1 \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_1 + \mathbf{H}_1 = \mathbf{S}_0^{-1} \mathbf{W}_1 \mathbf{S}_0 \quad (30)$$

alakba. Ahhoz, hogy ezt megoldhatóvá tegyük, \mathbf{S}_0 -t a

$$\bar{\mathbf{H}}_1 = \mathbf{S}_0^{-1} \mathbf{W}_1 \mathbf{S}_0 \quad (31)$$

feltételnek megfelelően kell meghatározunk, ahol \mathbf{W}_1 átlós mátrix. Ezen egyenlet és a (26) képlet támasztotta követelmények egyidejű kielégítéséhez itt ugyanolyan kevésbé adható általános útmutatás, mint a szekuláris perturbációk meghatározásához a klasszikus elméletben. Később azonban egy új algebrai módszer segítségével lehetségesnek fogjuk találni az elfajulások kiterjedt osztályának egyszerű tárgyalását (3. fej.).

Ha (31) teljesül, úgy (30) ugyanúgy megoldható, mint ahogy ez az 1. fej.-ben történt. Eközben \mathbf{S}_1 azon $\mathbf{S}_1(nm)$ elemei maradnak tetszőlegesek, amelyekre $v_0(nm)$ eltűnik, és ezt a határozatlanságot kell arra felhasználnunk, hogy a következő közelítő egyenletet, mely az

$$\mathbf{S}_2 \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_2 + \mathbf{F}_2 = \mathbf{S}_0^{-1} \mathbf{W}_2 \mathbf{S}_0 \quad (32)$$

alakra hozható, s a megoldhatóság szükséges feltételeit képező

$$\mathbf{F}_2(\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2; \mathbf{S}_1) = \mathbf{S}_0^{-1} \mathbf{W}_2 \mathbf{S}_0 \quad (31')$$

összefüggést átlós \mathbf{W}_2 mátrixszal elégítsük ki. Az eljárás folytatása világos.

A nehézség abban van, hogy az egyes közelítésekben az egyenleteket olyan mátrixokkal kell kielégítenünk, amelyek már nagyrészt meg vannak határozva, úgyhogy nem látható, vajon ezek az egyenletek valóban megoldhatók-e. Ismeretes azonban, hogy a klasszikus elméletben igen hasonló nehézség áll fenn. Ezek a

nehézségek legalább is a magasabb közelítések esetében kiküszöbölődnek, ha valamelyik közelítésben a rendszer nem-elfajulttá válik.

Tegyük fel pl., hogy a

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^0 + \lambda \mathbf{q}^{(1)} + \dots,$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^0 + \lambda \mathbf{p}^{(1)} + \dots$$

kifejezésekben a $\mathbf{p}^{(1)}$, $\mathbf{q}^{(1)}$ mátrixokat tényleg meghatároztuk, hogy tehát

$$\mathbf{Q} = \mathbf{q}^0 + \lambda \mathbf{q}^{(1)},$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}^0 + \lambda \mathbf{p}^{(1)}$$

mellett fennáll:

$$\mathbf{H}(\mathbf{PQ}) = \mathbf{W}_0 + \lambda \mathbf{W}_1 + \lambda^2 \mathbf{H}'_2 + \lambda^3 \mathbf{H}'_3 + \dots,$$

és legyen

$$v_0(nm) + \lambda v_1(nm) \neq 0, \quad \text{ha} \quad n \neq m.$$

Jelölje a $\mathbf{W}_0 + \lambda \mathbf{W}_1$ mátrixot röviden \mathbf{H}'_0 ; a

$$\mathbf{p} = \mathbf{S} \mathbf{P} \mathbf{S}^{-1},$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{S} \mathbf{Q} \mathbf{S}^{-1}$$

feltevéssel élve, az

$$\mathbf{S}(\mathbf{H}'_0 + \lambda^2 \mathbf{H}'_2 + \lambda^3 \mathbf{H}'_3 + \dots) \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{W}$$

feltételt kell teljesítenünk, ami az 1. fej. szerint az

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} + \lambda^2 \mathbf{S}_2 + \lambda^3 \mathbf{S}_3 + \dots$$

kifejezéssel elérhető. E megfontolások általánosítása arra az esetre, amikor csak az r -edik közelítésben jutunk nem-elfajult rendszerre, önként adódik.¹⁸

Befejezésül fontosnak véljük, hogy rámutassunk: a klasszikus perturbációelmélet sorai esetében ismert konvergencianehézségek, melyek a háromtestprobléma tárgyalásában oly nagy szerepet játszanak, itt a kvantumelméleti perturbációelméletben nem lépnek fel; inkább az várható, hogy itt a végesben haladó pályák általában is periodikusak.

3. fejezet. Kapcsolat a hermitikus alakok sajátértékeinek elméletével

1. §. *Általános módszer.* Az előzőekben a kvantumelméleti alapegyenletek megoldását a klasszikus elmélet mintájához lehetőleg szorosan ragaszkodva munkáltuk ki. A perturbációs számítás ezen formalizmusa mögött azonban egy igen egyszerű, tisztán algebrai kapcsolat húzódik meg, és igazán megéri a fáradságot, hogy azt a felszínre hozzuk. Eltekintve ugyanis attól, hogy ily módon az elmélet matematikai szerkezetébe mélyebb bepillantást nyerünk, ebből még az az előny is származik, hogy értékesíthetjük a matematika készen álló módszereit és eredményeit. Így az energiakonstansok („termek”) új definíciójához fogunk jutni, mely aperiodikus mozgások, tehát folytonosan változó indexek esetén is érvényes marad. Ezen keresztül kilátás van arra, hogy módszereket találjunk az energia közvetlen kiszámítására, a mozgásprobléma explicit megoldása nélkül, melyek a komplex integrálás Sommerfeld-féle módszerének felelnek meg az eddigi elméletben. Ezek után megadhatjuk

majd az elfajult rendszerek kiterjedt osztályára a perturbációk teljes tárgyalását, ami a fent kifejtett perturbációs módszerekkel még nem volt lehetséges.

Jellemezzon valamely f szabadsági fokú problémát a $\mathbf{H}(\mathbf{pq})$ energiafüggvény. Mindenek előtt választható olyan $\mathbf{p}_k^0, \mathbf{q}_k^0$ mátrixrendszer, amely a 2. fejt. (3) alatt felírt felcserélési szabályokat minden esetre teljesíti: választhatjuk pl. a harmonikus oszcillátorok kölcsönhatásmentes rendszerének megfelelő $\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k$ mátrixokat.

Ekkor, mint azt fent a 2. fejt. 1. §-ban említettük, a dinamikai feladat, vagyis a $\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k$ megoldás meghatározása, így is megfogalmazható:

Olyan $(\mathbf{p}_k^0 \mathbf{q}_k^0) \rightarrow (\mathbf{p}_k \mathbf{q}_k)$ transzformációt kell találnunk, mely a 2. fejt. (3) egyenleteit változatlanul hagyja s ugyanakkor az energiamátrixot átlóssá teszi.

A mátrixok transzformációit úgy tekinthetjük át legjobban, ha a mátrixokat mint transzformációk, ill. bilineáris alakok együttható-rendszereit fogjuk fel. Ezért előre bocsátjuk az ilyen alakok algebrájának néhány tételét.

Minden $\mathbf{a} = (a(nm))$ mátrixhoz tartozik egy a változók x_1, x_2, \dots és y_1, y_2, \dots sorozatából képezett

$$A(xy) = \sum_{nm} a(nm) x_n y_m \quad (1)$$

bilineáris alak. Ha a mátrix *hermitikus*, azaz az $\tilde{\mathbf{a}} = (a(mn))$ *transzponált mátrix* egyenlő az eredeti mátrix komplex-konjugáltjával:

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{a}^*, \quad a(mn) = a^*(nm), \quad (2)$$

úgy az A alak valós értékeket vesz fel, hacsak az y_n változók helyére az x_n -ek komplex-konjugáltjait helyettesítjük:

$$A(xx^*) = \sum_{nm} a(nm) x_n x_m^*. \quad (1a)$$

Szeretnénk itt emlékeztetni a könnyen igazolható

$$(\tilde{\mathbf{a}}\mathbf{b}) = \tilde{\mathbf{b}}\mathbf{a} \quad (3)$$

szabályra. Vessük alá most az x_n -eket lineáris transzformációnak:

$$x_n = \sum_l v(ln) y_l \quad (4)$$

a $\mathbf{v} = (v(ln))$ komplex mátrix segítségével.

Ekkor az A alak az

$$A(xx^*) = B(yy^*) = \sum_{nm} b(nm) y_n y_m^* \quad (5)$$

alakba megy át, ahol

$$b(nm) = \sum_{kl} v(nk) a(kl) v^*(ml),$$

vagy mátrix-írásmódban:

$$\mathbf{b} = \mathbf{v}\mathbf{a}\mathbf{v}^*. \quad (6)$$

Azt mondjuk, hogy a \mathbf{b} mátrix \mathbf{a} -ból a \mathbf{v} transzformációval áll elő.

A \mathbf{b} mátrix ismét hermitikus, minthogy (3) szerint fennáll:

$$\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{v}^* \tilde{\mathbf{a}} \mathbf{v} = \mathbf{v}^* \mathbf{a}^* \mathbf{v} = \mathbf{b}^*. \quad (7)$$

A v mátrixot *ortogonálisnak** mondjuk, ha a megfelelő transzformációval szemben az

$$E(xx^*) = \sum_n x_n x_n^*$$

Hermite-féle egységforma invariáns; az imént nyert eredmény szerint ez akkor és csak akkor következik be, ha

$$v\tilde{v}^* = \mathbf{1}, \quad \text{vagy} \quad \tilde{v}^* = v^{-1}. \quad (8)$$

Így pl. az I. rész 2.-§-ában említett permutációs mátrixok valós ortogonális mátrixok.

Véges számú változó esetén — mint ismeretes —, valamely A alak ortogonális transzformáció segítségével mindenkor négyzetösszeg alakjára hozható (főtengely-transzformáció)¹⁹:

$$A(xx^*) = \sum_n W_n y_n y_n^*. \quad (9)$$

A mátrixokra vonatkozóan ez a következőt jelenti: Van olyan mátrix, melyre fennáll

$$v\tilde{v}^* = \mathbf{1} \quad \text{és} \quad v\tilde{v}^* = v\tilde{v}^{-1} = W, \quad (10)$$

ahol $W = (W_n \delta_{nm})$ átlós mátrix.

Végtelen mátrixokra valamennyi eddig vizsgált esetben hasonló tétel érvényes; megtörténhet azonban, hogy a jobb oldalon az n index egy diszkrét számsorozat mellett egy folytonos értéktartományt is befut, melynek (9)-ben és a (4) transzformációban egy-egy integrál-járulék felel meg.²⁰

A W_n mennyiségeket „sajátértékek”-nek nevezik, azok összessége képezi az A alak „matematikai” spektrumát, mely „pontospektrum”-ból és „folytonos spektrum”-ból áll. Ez, mint látni fogjuk, azonos a fizika „termspektrum”-ával, míg a „frekvencia-spektrum” ebből különbségeket képezve áll elő.

Ez a főtengely-transzformáció közvetlenül megadja dinamikai problémánk megoldását: olyan $(p^0 q^0) \rightarrow (pq)$ transzformációt kell találnunk, mely a 2. fej. (3) egyenleteit változatlanul hagyja és ugyanakkor az energiamátrixot átlós alakra transzformálja.

Az algebra fent idézett tétele szerint létezik olyan S ortogonális mátrix, melyre tehát fennáll

$$S\tilde{S}^* = \mathbf{1}, \quad \tilde{S}^* S = \mathbf{1}, \quad (11)$$

amely rendelkezik azzal a tulajdonsággal, hogy a

$$\left. \begin{aligned} p_k &= S p_k^0 \tilde{S}^* = S p_k^0 S^{-1}, \\ q_k &= S q_k^0 \tilde{S}^* = S q_k^0 S^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

transzformáció 1. a hermitikus p_k^0, q_k^0 mátrixokat hermitikus p_k, q_k mátrixokba viszi át, 2. a 2. fej. (3) egyenleteit invariánsan hagyja, 3. az energiát a

$$H(pq) = S H(p^0 q^0) S^{-1} = W \quad (13)$$

átlós mátrixba viszi át.

A következőkben megvizsgáljuk ezen megoldás egyértelműségét, mindenek előtt azt, hogy valamely másik T ortogonális transzformáció segítségével nem nyer-

* Ma *unitérnek* mondjuk az ilyen mátrixot. (Ford. megj.)

hetünk-e más energia-értékeket. Tegyük fel, hogy

$$TH(p^0q^0)T^{-1} = W'$$

átlós mátrix, mely különbözik W -től. Ekkor

$$TS^{-1}SHS^{-1}ST^{-1} = TS^{-1}W(TS^{-1})^{-1}$$

adódnék, és kérdésünk azt jelenti, hogy lehetséges-e valamely W átlós mátrixból

$$W' = MWM^{-1}, \quad \tilde{M}\tilde{M}^* = 1 \quad (14)$$

szerint egy másik átlós mátrixot képezni oly módon, hogy W' ne az átlós elemek permutálása útján álljon elő W -ből.

A (14) egyenlet így írható:

$$W'M - MW = 0,$$

azt fejezi ki tehát, hogy

$$M(nm)(W_n - W_m) = 0. \quad (14a)$$

Az M mátrix ortogonális voltából az $m = n$ speciális esetben következik

$$\sum_k |M(nk)|^2 = 1, \quad \sum_k |M(kn)|^2 = 1;$$

következésképpen rögzített n mellett sem az $M(nk)$, sem az $M(kn)$ mátrixelemek nem tűnhetnek el mind. Ekkor pedig (14a) azt adja, hogy minden n -hez bizonyosan tartozik olyan m , amelyre teljesül $W'_n = W_m$, azaz a W_m -ek között valamennyi W'_n fellép. Ugyanígy következtethetünk ennek megfordítására is.

Így tehát a (12)-ből (meghatározott p_k^0 , q_k^0 mellett) nyerhető valamennyi megoldás a stacionárius állapotok energiáira ugyanazon értékeket szolgáltatja, összhangban a 2. fej.-ben kimondott sejtéssel, mely szerint a fellépő energiákat a dinamikai alapegyenletek mindenkor egyértelműen meghatározzák.

Az elfajult rendszereket az jellemzi, hogy többszörös sajátértékek lépnek fel. A W_n sajátérték multiplicitása, azaz a (4) egyenlet lineárisan független $v(ln)$ megoldásainak száma a szóban forgó állapot statisztikus súlyát adja meg.

A (9) egyenlet fontossága a mi fizikai elméletünk számára abban rejlik, hogy a véges vagy korlátos végtelen alakok elméletében különböző módszerek állnak rendelkezésre²¹, melyekkel valamely alak sajátértékei meghatározhatók anélkül, hogy a transzformációt a valóságban elvégeznénk. Remélhető, hogy az ilyen módszerek bizonyos fizikai rendszerek későbbi tárgyalása során majd jó szolgálatokat tesznek.

2. §. *Alkalmazás a perturbációelméletre.* A következőkben meg kívánjuk mutatni, hogy a dinamikai probléma itt kifejtett algebrai felfogása nem csak pontosan azokhoz a képletekhez vezet, amelyeket korábban (1. fej. 4. §) a klasszikus mechanika perturbációelmélete nyomán vezettünk le, hanem az elfajult rendszerek tárgyalása esetében még jelentékenyen felette is áll az eddigi elméletnek.

Ismét feltesszük tehát, hogy H ilyen alakú:

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots,$$

ahol a H_0 meghatározta dinamikai problémának p_k^0 , q_k^0 megoldása. Ezeket a mennyiségeket választjuk kiindulásképpen; ezekből kell egy S ortogonális transzfor-

mációval a p_k , q_k mennyiségeket meghatározzunk. Természetesen \mathbf{H} feltételezett alakja elvileg nem jelenti az általánosság korlátozását, minthogy \mathbf{H} -ból mindenkor leválasztható a tetszőleges, kívánt alakú \mathbf{H}_0 ; csak a λ szerint haladó hatványsor konvergenciája függ majd lényegesen \mathbf{H}_0 alkalmas választásától.

Abból a célból, hogy a

$$\sum_{mn} H_{mn} x_m x_n^*$$

hermitikus alakot főtengelekre transzformáljuk, mint ismeretes, a következőképpen járhatunk el:

Keressük a

$$W x_k - \sum_l H(kl) x_l = 0 \quad (15)$$

lineáris egyenletek megoldását; ez csak a W paraméter bizonyos értékei mellett lehetséges, nevezetesen ha $W = W_n$, ahol W_n a sajátértékek (energiaértékek) jelölésére szolgál. Mindenek előtt feltesszük, hogy nincs elfajulás, azaz a W_n -ek mind különbözők. Ekkor minden W_n -hez tartozik egy-egy $x_k = x_{kn}$ megoldás, mely egy állandó erejéig meg van határozva; fennáll tehát a

$$W_n x_{kn} - \sum_l H(kl) x_{ln} = 0,$$

és a

$$W_m x_{km}^* - \sum_l H^*(kl) x_{lm}^* = 0$$

azonosság. Szorozzuk meg az elsőt x_{km}^* -gal, a másodikat x_{kn} -nel és összegezzünk k -ra. Kivonással kapjuk H hermitikus jellege folytán:

$$(W_n - W_m) \sum_k x_{kn} x_{km}^* = 0.$$

Az arányossági tényező alkalmas választásával elérhető továbbá, hogy

$$\sum_k x_{kn} x_{kn}^* = 1$$

legyen. Következésképpen az x_{kn} -ek alkotta

$$\mathbf{S} = (x_{kn})$$

ortogonális mátrix. Ez éppen az, mely az adott alakot négyzetösszeggé transzformálja; ha ugyanis az

$$x_k = \sum_n x_{kn} y_n$$

kifejezést az adott alakba helyettesítjük, kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{kl} H(kl) x_k x_l^* &= \sum_{kl} \sum_{mn} H(kl) x_{km} x_{ln}^* y_m y_n^* \\ &= \sum_{mn} \sum_l W_m x_{lm} x_{ln}^* y_m y_n^* \\ &= \sum_m W_m y_m y_m^*. \end{aligned}$$

Feltevésünk szerint a (15) egyenlet együtthatói a következő alakúak:

$$H(kl) = \delta_{kl} W_l^0 + \lambda H_1(kl) + \lambda^2 H_2(kl) + \dots$$

Ennek megfelelően (15) megoldását a

$$\left. \begin{aligned} W &= W^0 + \lambda W^{(1)} + \lambda^2 W^{(2)} + \dots \\ x_k &= x_k^0 + \lambda x_k^{(1)} + \lambda^2 x_k^{(2)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

alakú sorok segítségével kíséreljük meg előállítani. Helyettesítsük be ezt (15)-be, így az

$$\left. \begin{aligned} \text{a)} \quad x_k^0 (W^0 - W_k^0) &= 0, \\ \text{b)} \quad x_{(k)}^1 (W^0 - W_k^0) &= -x_k^0 W^{(1)} + \sum_l H^{(1)}(kl) x_l^0, \\ \text{c)} \quad x_k^{(2)} (W^0 - W_k^0) &= -(x_k^{(1)} W^{(1)} + x_k^{(0)} W^{(2)}) + \\ &\quad + \sum_l (H^{(1)}(kl) x_l^{(1)} + H^{(2)}(kl) x_l^{(0)}) \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

közelítő egyenleteket kapjuk. A (17a) egyenletből következik, hogy W -nek meg kell egyeznie a W_k -k valamelyikével, ellenkező esetben ugyanis valamennyi x_k^0 eltűnnék, s ekkor a következő közelítő egyenletekből rendre következtethetnénk $x_k^{(1)}, x_k^{(2)}, \dots$ eltűnésére.

Tegyük fel, hogy a kiindulásképpen választott rendszer nem-elfajult, azaz: hogy valamennyi W_k^0 különböző; ekkor (17a) megoldása:

$$W = W_n^0; \quad x_{nn}^0 = y_n^0; \quad x_{kn}^0 = 0, \quad \text{ha } k \neq n. \quad (18)$$

Itt y_n^0 tetszőleges szám.

Helyettesítsük be ezt (17b)-be; ekkor a $k=n$, ill. $k \neq n$ esetben kapjuk:

$$\begin{aligned} 0 &= y_n^0 (-W^{(1)} + H^{(1)}(nn)), \\ x_k^{(1)} (W_n^0 - W_k^0) &= H^{(1)}(kn) y_n^0, \quad k \neq n. \end{aligned}$$

A megoldás tehát így hangzik:

$$W^{(1)} = H^{(1)}(nn); \quad x_{nn}^{(1)} = y_n^{(1)}; \quad x_{kn}^{(1)} = -\frac{H^{(1)}(kn)}{h\nu_0(kn)} y_n^0, \quad \text{ha } k \neq n, \quad (19)$$

ahol $y_n^{(1)}$ ismét tetszőleges szám.

Hasonlóképpen következik (17c)-ből:

$$\left. \begin{aligned} W^{(2)} &= H^{(2)}(nn) - \frac{1}{h} \sum_l \frac{H^{(1)}(nl) H^{(1)}(ln)}{\nu^0(ln)}, \\ x_{nn}^{(2)} &= y_n^{(2)}, \\ x_{kn}^{(2)} &= \left(\frac{1}{h^2} \sum_l \frac{H^{(1)}(kl) H^{(1)}(ln)}{\nu_0(kn) \nu_0(ln)} - \frac{H^{(1)}(nn) H^{(1)}(kn)}{h^2 \nu_0(kn)^2} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{H^{(2)}(kn)}{h\nu_0(kn)} \right) y_n^0 - \frac{H^{(1)}(kn)}{h\nu_0(kn)} y_n^{(1)}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Ekkor (17b) bal oldala a

$$k = n, n+1, \dots, n+r-1$$

értékekre eltűnik; ily módon az r számú

$$W^{(1)} y_{kn}^0 - \sum_{l=1}^r H^{(1)}(n+k, n+l) y_{ln}^0 = 0 \quad (k=1, 2, \dots, r) \quad (24)$$

egyenletből álló egyenletrendszerre jutunk, melynek együtthatói ismét hermitikus mátrixot alkotnak.

Ha az együtthatók determinánsát zérussal tesszük egyenlővé, úgy $W^{(1)}$ -re r -edfokú szekuláris egyenletet nyerünk:

$$\det (W^{(1)} \delta_{kl} - H^{(1)}(n+k, n+l)) = 0, \quad (25)$$

melynek gyökei bizonyosan valóságok. Minden gyökhöz (24)-nek egy vagy több független megoldása tartozik.

Kiválasztva egy ilyen megoldást, ezzel a közelítő eljárást folytathatjuk; itt azonban ezt nem fejtjük ki részletesen.

Megelégszünk azzal, hogy beláttuk: algebrai módszerünkkel tárgyalni tudunk minden véges multiplicitású elfajulást, azaz vissza tudjuk vezetni a problémát algebrai egyenletek megoldására. Ha pl. minden sajátérték kétszeres, vagyis ha mind-egyik sajátértékhez tartozik egy-egy eltűnő $v_0(nm)$ frekvencia, úgy a perturbációs probléma másodfokú egyenletre vezet:

$$\begin{vmatrix} W^{(1)} - H^{(1)}(n, n) & -H^{(1)}(n, n+1) \\ -H^{(1)}(n+1, n) & W^{(1)} - H^{(1)}(n+1, n+1) \end{vmatrix} = 0.$$

Ezzel az esettel állunk szemben, ha két, eredetileg egyforma, nem-elfajult rendszer (mely rendszerek frekvenciáitól megkínánjuk, hogy azok valamennyien különbözők legyenek) között valamiféle erők csatolást létesítenek.

Érdekes továbbá a

$$\sum_k x_{kn}^0 x_{kn}^{*0} = 1$$

ortogonalitási összefüggés jelentése elfajult rendszerek esetében. Tekintettel (23)-ra ez az összefüggés a

$$\sum_{l=1}^r y_{ln}^0 y_{ln}^{*0} = 1$$

összefüggésbe megy át. Innen következik, hogy ha m az $n, n+1, \dots, n+r-1$ sorozatot alkotó számok valamelyike, a k szám pedig nem fordul elő e sorozatban, a

$$\sum_{m=n}^{n+r-1} p^0(mk) p^{*0}(mk) \\ \sum_{m=n}^{n+r-1} q^0(mk) q^{*0}(mk)$$

összegek elfajulás esetén is meg vannak határozva, azaz: ezek az összegek invariánsok azon transzformációkkal szemben, amelyek a 2. fejj. (19) képlete szerint, elfajulás esetén valamely \mathbf{p}, \mathbf{q} megoldásból attól lényegesen különböző \mathbf{p}', \mathbf{q}' megoldást állítanak elő. Ez az eredmény matematikai kifejezést ad az ún. spektroszkópiai stabilitásnak, mely a finomszerkezet-intenzitások újabb elméleteiben (vö. 4. fejj.) fontos szerepet játszott.

3. §. *Folytonos spektrumok.* A folytonos és vonalas spektrumok egyidejű fel-
lépte ugyanazon mozgásegyenletek és felcserélési összefüggések megoldásaiként az
új elmélet különösen lényeges vonásának látszott számunkra. A spektrumok két
fajának e szoros kapcsolata ellenére azonban mind matematikai, mind fizikai szem-
pontból jellegzetes különbségek állnak fenn közöttük, melyek megfelelnek a Fou-
rier-sor és a Fourier-integrál között a klasszikus elméletben fennálló különbségnek;
ezért szükségesnek véljük, hogy a folytonos spektrumok tárgyalását is nagy vona-
lakban kifejtjük itt. A végtelen kvadratikusság alakok esetében fellépő folytonos
spektrumok matematikai elméletét *Hilbert* alapvető vizsgálatai nyomán *Hellinger*
(l. c.) fejtette ki részletesen korlátos kvadratikusság alakok esetére. Ha itt vesszük
magunknak a szabadságot, hogy *Hellinger* eredményeit átvigyük a nálunk fellépő
nem-korlátos alakokra, úgy ez azért látszik számunkra jogosnak, mert *Hellinger*
módszerei nyilvánvalóan teljes mértékben megfelelnek a kitűzött feladat fizikai
értelmének.

Vegyük először szemügyre röviden problémánk klasszikus megfelelőjét, az
aperiodikus mozgást és annak Fourier-integrálelőállítását. Míg egy Fourier-sorban
valamely $e^{2\pi i\nu t}$ rezgéshez mindenkor egy meghatározott $a(\nu)$ amplitúdó tartozik,
a Fourier-integrál esetében $a(\nu)$ helyére egy $\varphi(\nu)d\nu$ alakú mennyiség lép, ahol a
 $\varphi(\nu)$ a $d\nu$ frekvenciaközkhöz rendelt amplitúdósűrűségnek nevezhető. Fizikai szem-
pontból közvetlenül nyilvánvaló, hogy bármely mennyiség, pl. az intenzitás, a
polarizáció stb., hasonlóképpen mindenkor csak ν és $\nu + d\nu$ közrefogta $d\nu$ frekven-
ciaközre vonatkoztatható, nem rendelhető hozzá azonban valamely meghatározott
frekvenciához magához. Egészen hasonló viszonyokat kell várnunk a kvantum-
mechanikában is. A $q(kl)$ mennyiségek helyére $q(kW)dW$, ill. $q(WW')dWdW'$
alakú mennyiségek lépnek aszerint, hogy a két index közül egy fekszik-e a folytonos
tartományban, vagy pedig mind a kettő. Még magának a W energiának a helyére
is a $d\nu$ közre vonatkoztatott „összenergiának” kell majd lépnie, hiszen a folytonos
tartományban annak valószínűsége, hogy az atom valamely meghatározott W
energiával rendelkezék, zérussal egyenlő. Abból a célból, hogy e kérdések körül
világosságot teremtsünk, a következőkben *Hellinger* nyomán röviden vázoljuk a
matematikai elméletet.

Végtelen kvadratikusság alakok esetében megtörténhet, hogy a

$$\sum_{mn} H(mn)x_m x_n^*$$

alak ortogonális transzformáció segítségével nem hozható a $\sum_n W_n y_n y_n^*$ alakra.
Ekkor a korlátos alakokra vonatkozó eredmények mintájára feltehetjük, hogy
létezik egy folytonos spektrumot tartalmazó

$$\sum_{mn} H(mn)x_m x_n^* = \sum_n W_n y_n y_n^* + \int W(\varphi)y(\varphi)y^*(\varphi)d\varphi \quad (26)$$

előállítás, ahol is az eredeti változók „ortogonális transzformáción” keresztül függ-
nek össze az új $y_n, y(\varphi)$ változókkal; csak azt kell pontosabban kifejtenuk, mit
értünk itt ortogonális transzformáción.

Vegyük szemügyre ismét a (15) lineáris egyenleteket:

$$Wx_k - \sum_l H(kl)x_l = 0; \quad (27)$$

a (26) képletben akkor lép fel integrál-járulék, ha nem csak diszkrét W_n értékek léteznek, melyekre ezek az egyenletek megoldhatók, hanem létezik az ilyen W értékeknek egy kontinuum: a W -tengely egy vagy több szakasza (folytonos spektrum). E kontinuum valamely W pontjához tartozik tehát egy $x_l(W)$ megoldás (esetleg több megoldás is; ezt az esetet itt az egyszerűség kedvéért kizárjuk). Két ilyen W érték, W' és W'' esetére felírhatók tehát a

$$\left. \begin{aligned} W' x_k(W') - \sum_l H(kl) x_l(W') &= 0, \\ W'' x_k^*(W'') - \sum_l H^*(kl) x_l^*(W'') &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

egyenletek, melyekből — mint fent — következtethetünk

$$(W' - W'') \sum_k x_k(W') x_k(W'') = 0 \quad (29)$$

fennállására.

Ha megkíséreljük kiegészíteni ezeket az ortogonalitási összefüggéseket a

$$\sum_k |x_k(W)|^2 = 1$$

normálási feltétellel, úgy látjuk, hogy a

$$\sum x_k(W') x_k(W'')$$

kétváltozós függvénynek csúnya diszkontinuitása volna, amennyiben ez a függvény egyáltalán léteznék. Valójában a szemügyre vett összeg nem konvergál, így tehát nem is állít elő semmiféle függvényt.

Ennélfogva szükségünk van a normálás valamely más fajtájára. Írjuk *Hellinger* nyomán:

$$\sum_k \left| \int x_k(W) dW \right|^2 = \varphi(W). \quad (30)$$

A bal oldalon álló sor általában konvergens és egy monoton $\varphi(W)$ függvényt állít elő, mely bizonyos megszorításokkal önkényesen választható, hiszen az $x_k(W)$ -k csupán egy k -tól független tényező erejéig vannak meghatározva. Az $x_k(W)$ megoldásokat rögzítő ezen $\varphi(W)$ függvény fizikai jelentésével később foglalkozunk részletesen. *Hellinger* $\varphi(W)$ -t „bázisfüggvény”-nek nevezi és megmutatja, hogy az ortogonalitási feltételek a következő alakra hozhatók: Legyen Δ_1 és Δ_2 a folytonos spektrum két számköze, Δ_{12} pedig a közös részük (mely üres is lehet); ekkor fennáll:

$$\begin{aligned} \sum_k \int_{\Delta_1} x_k(W') dW' \int_{\Delta_2} x_k(W'') dW'' &= \int_{\Delta_{12}} d\varphi(W) \\ &= \varphi(W^{(2)}) - \varphi(W^{(1)}), \end{aligned} \quad (31)$$

ahol $W^{(1)}$, $W^{(2)}$ a Δ_{12} köz végpontjai. Ha tehát a Δ_1 , Δ_2 számközök nem fedik át egymást, a jobb oldalon zérus áll.

Ha a Δ_1 , Δ_2 , Δ_{12} közöket igen kicsinyeknek gondoljuk el, úgy szimbolikusan írható:

$$\sum_k x_k(W') dW' \cdot x_k(W'') dW'' = d\varphi(W). \quad (32)$$

Ez az összefüggés kézenfekvővé teszi a gondolatot, hogy az $x_k(W)dW$ mennyiségekkel általában mint (27) „differenciálmegoldásai”-val operáljunk; itt arra kell csupán ügyelnünk, hogy a megfelelő egyenleteket mindenkor a (31) minta szerint kell értelmeznünk; ezek a differenciálmegoldások azután közönséges értelemben ortogonálisak, de nem 1-re, hanem a $\varphi(W)$ bázisfüggvény differenciáljára vannak normálva.

Az x_{kn} diszkrét értékek, valamint az egyik indexben diszkrét, a másik index értékeire folytonosan eloszló $x_k(W)$ -k összessége képezi az

$$S = (x_{kn}, x_k(W)dW)$$

„ortogonális” mátrix elemeit, mely vázlatosan így szemléltethető:

$$S = \left(\begin{array}{c} \begin{array}{c} \xrightarrow{k} \\ n \\ \vdots \\ \downarrow \\ w \\ \vdots \end{array} \quad \begin{array}{c} \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \text{|||||} \\ \text{|||||} \\ \text{|||||} \end{array} \end{array} \right). \quad (33)$$

Az egész mátrixra vonatkozó ortogonalitási és normálási feltételek négy különböző típusba sorolhatók:

$$\left. \begin{aligned} \sum_k x_{km} x_{kn}^* &= \delta_{mn}; \\ \sum_k x_{kn} x_k^*(W) dW &= 0; \quad \sum_k x_k(W) dW \cdot x_{kn}^* = 0; \\ \sum_k x_k(W') dW' x_k^*(W'') dW'' &= d\varphi. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Felírhatjuk az oszlopokra vonatkozó ortogonalitási összefüggéseket is; ezek így festenek:

$$\begin{aligned} \sum_n x_{kn} x_{ln}^* + \int \frac{x_k(W) dW \cdot x_l^*(W) dW}{d\varphi} \\ = \sum_n x_{kn} x_{ln}^* + \int \frac{dW}{\varphi'} x_k(W) x_l^*(W) = \delta_{kl}; \end{aligned} \quad (35)$$

itt $\varphi' = \frac{d\varphi}{dW}$.

Ezen mátrix segítségével kell az x_n -eket az új $y_n, y(\varphi)d\varphi$ változókba transzformálni; legyen:

$$\left. \begin{aligned} y_n &= \sum_k x_{kn} \cdot x_k, \\ y(\varphi) d\varphi &= \sum_k x_k(W) dW \cdot x_k. \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

Egyszerű számítással nyerjük:

$$\sum_n W_n y_n y_n^* + \int W(\varphi) y(\varphi) y^*(\varphi) d\varphi = \sum_{kl} H(kl) x_k x_l^*. \quad (37)$$

Ezzel végrehajtottuk a főtengelytranszformációt.

Vizsgáljuk meg most, milyen előállítást nyerünk a koordináta- és impulzus-mátrixokra ezen ortogonális transzformáció segítségével, azaz: mit jelentenek itt a

$$\mathbf{p} = \mathbf{S}\mathbf{p}_0\mathbf{S}^{-1} \quad (38)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{S}\mathbf{q}_0\mathbf{S}^{-1}$$

egyenletek, vagy általában

$$\mathbf{f}(\mathbf{pq}) = \mathbf{S}\mathbf{f}(\mathbf{p}_0\mathbf{q}_0)\mathbf{S}^{-1}. \quad (39)$$

Pl. a \mathbf{p} mátrix így kapott elemei négy típusba sorolhatók:

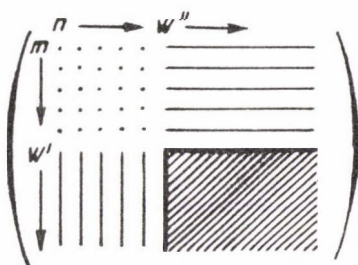
$$\left. \begin{aligned} p(mn) &= \sum_{kl} x_{km}^* p^0(kl) x_{ln}, \\ p(mW)dW &= \sum_{kl} x_{km}^* p^0(kl) x_l(W) dW, \\ p(Wn)dW &= \sum_{kl} x_k^*(W) dW \cdot p^0(kl) x_{ln}, \\ p(W'W'')dW'dW'' &= \sum_{kl} x_k^*(W') dW' p^0(kl) x_l(W'') dW''. \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

Hasonló módon általánosságban korábban kifejezésre juttatott várakozásunknak megfelelően a $p(mn)$ amplitúdó helyére egy folytonosan változó index esetén $p(mW)dW$ „amplitúdósűrűség” lép, melyet valamely dW közre vonatkoztatunk. Itt nem szükséges, hogy folytonosan változó indexnek éppen az energiát válasszuk. Az energia helyett bevezethetjük pl. a $\varphi(W)$ mennyiséget. Ekkor $p(mW)dW$ helyét $p(m\varphi) \frac{dW}{d\varphi} d\varphi$ foglalná el. Végül a W_n energiát a folytonos esetben a $W(\varphi)d\varphi$ mennyiség helyettesíti. Az egyes atom energiája helyére egyfajta összenergia lép tehát, melyet a dW közre vonatkoztathatunk. Ennek folytán $d\varphi$ lényegében a W és $W+dW$ közbe eső energiával rendelkező atomok számát jelenti, vagy annak a priori valószínűségét, hogy az atom energiája W és $W+dW$ közé esik. Itt ismerhetjük fel a legvilágosabban a különbséget egyrésről a diszkrét stacionarius állapotok, másrésről a folytonos állapotsokaságok között, és látjuk, hogy a statisztikus súlyok problémája egyszerű kapcsolatban áll a (27) megoldás normálásának kérdésével. Diszkrét állapotok esetében, ha nincsenek többszörös sajátértékek, azt az egyszerű fizikai feltevést tesszük, hogy minden állapot statisztikus súlya 1 legyen. Ennek az felel meg, hogy az x_{kn} -eket a

$$\sum_{kn} x_{kn} x_{kn}^* = 1$$

követelmény szerint normáltuk. Folytonos állapotsokaságok esetében az *a priori* valószínűségeket nem lehetett így egyszerűen rögzíteni; azok meghatározásához, s ezzel együtt a φ függvény meghatározásához az adott probléma behatóbb vizsgálatára van szükség. Ennek folytán lehetséges, hogy a folytonos spektrumok esetében az átmeneti valószínűségek összefüggése az amplitúdókkal valamivel bonyolultabb alakot ölt, mint a vonalas spektrumok esetében.

A (40) mintának megfelelően előállított p , q vagy $f(pq)$ mátrixok általában az alábbi szkéma segítségével szemléltethetők:



Ezen szkéma fizikai jelentése nyilvánvaló.

Négy fajta „átmenet” van, melyek egyszerű analogonjai a hidrogén atom eddigi elméletében posztulált „átmeneteknek”: 1. ellipszisről ellipszisére, 2. ellipszisről hiperbolára, 3. hiperboláról ellipszisére, 4. hiperboláról hiperbolára.

A (38) és (40) képletekkel szemben még felhozható az az ellenvetés, hogy a jobb oldallon álló végtelen összegek egyes esetekben bizonyosan nem konvergálnak, így tehát nem is állítanak elő semmiféle függvényt, hiszen a klasszikus elméletben is megtörténik olykor, hogy valamely $f(pq)$ függvény előállítása Fourier-integrál segítségével nem lehetséges, pl. akkor ha a szóban forgó f függvények a t idő nagy értékeire az időben lineárisan növekszenek (ez általában érvényes a koordinátára). Erre az ellenvetésre azt válaszolhatjuk azonban, hogy az atomok megfigyelhető hatásai (pl. a sugárzás, valamely más atomra kifejtett erő stb.) általában nem tartoznak a függvényeknek ehhez a fajtájához, hogy tehát az ezeknek megfelelő (40) típusú összegek minden bizonnyal konvergálnak.

4. fejezet. Az elmélet fizikai alkalmazásai

1. §. Tételek az impulzusról és az impulzusmomentumról; intenzitásképletek és kiválasztási szabályok. Az előzőekben megalapozott általános elmélet alkalmazásaként most vezessük le az impulzusmomentum „kvantálására” vonatkozó ismert megállapításokat; vezessünk le továbbá néhány evvel összefüggő törvényszerűséget.

Egyszersmind megismerünk majd néhány jellegzetes példát a kvantummechanikai mozgásegyenletek integrálására. A korábban tárgyalt perturbációs módszerek természetesen csak akkor alkalmazhatók sikerrel, ha az integrálást egy sor különösen egyszerű példa esetében, melyeket perturbálatlan rendszernek (H_0) választhatunk, előzőleg más módszerrel elvégeztük. A kvantummechanikai mozgásegyenletek esetében, melyeket a mátrixegyenletek egyes komponenseinek felírásával nyerünk, azzal a különleges nehézséggel találjuk szemben magunkat, hogy — eltekintve a harmonikus oszcillátor példájától — minden egyes egyenletben végtelen sok ismeretlen lép fel. Az alábbiakban többször felhasználásra kerül és — úgy látszik — igen gyakran alkalmazható e nehézségek leküzdésére az eljárás, melyet a következőkben ismertetünk. A klasszikus elmélet analógiájára mindenek előtt mozgásintegrálokat keresünk, azaz olyan $A(p, q)$ függvényeket, amelyek a mozgásegyenletek és a felcserélési összefüggések folyományaként időben állandók és így nem-elfajult

periodikus rendszerek esetében átlós mátrix alakját öltik. Legyen $\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ valamely függvény; a

$$\varphi \mathbf{A} - \mathbf{A} \varphi = \psi$$

különbség a felcserélési szabályok segítségével kiszámítható. Ha \mathbf{A} átlós mátrix, úgy olyan egyenletek rendszerét nyerjük, amelyek mindegyike csak véges számú ismeretlent tartalmaz, mégpedig a φ és ψ mátrixok egy-egy komponensét (és \mathbf{A} -nak két-két átlós elemét).

Ha Descartes-koordináták használata mellett $\mathbf{H} = \mathbf{H}'(\mathbf{p}) + \mathbf{H}''(\mathbf{q})$ — ami tehát a relativisztikus mechanikát is magában foglalja — azonnal látható, hogy az \mathbf{M} impulzusmomentum

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_x &= \sum_{k=1}^{f/3} (\mathbf{p}_{ky} \mathbf{q}_{kz} - \mathbf{q}_{ky} \mathbf{p}_{kz}), \\ \mathbf{M}_y &= \sum_{k=1}^{f/3} (\mathbf{p}_{kz} \mathbf{q}_{kx} - \mathbf{q}_{kz} \mathbf{p}_{kx}), \\ \mathbf{M}_z &= \sum_{k=1}^{f/3} (\mathbf{p}_{kx} \mathbf{q}_{ky} - \mathbf{q}_{kx} \mathbf{p}_{ky}) \end{aligned} \quad (1)$$

komponensei ugyanazon általános feltételek mellett lesznek állandók, mint a klasszikus elméletben. Mondjuk \mathbf{M}_z idő szerint képezett deriváltjára ugyanis

$$\dot{\mathbf{M}}_z = \varphi(\mathbf{q}) + \psi(\mathbf{p})$$

alakú összeg adódik, és abból, hogy az összes \mathbf{p} egymás között és az összes \mathbf{q} egymás között felcserélhető, következik, hogy φ és ψ ugyanazon feltételek mellett tűnik el, mint a klasszikus elméletben.

Ugyanezt a megjegyzést alkalmazhatjuk a

$$\mathbf{p} = \sum_{k=1}^{f/3} \mathbf{p}_k, \quad \text{azaz} \quad \mathbf{p}_x = \sum_{k=1}^{f/3} \mathbf{p}_{kx}, \dots$$

transzlációs impulzusra is, mely ugyancsak állandónak adódik. Érvényes tehát a tömegközéppont-tétel is, éppúgy, mint a klasszikus elméletben.

Itt mindjárt feljegyezzünk egy később felhasználásra kerülő képletet, melyet a 2. feje. (3) felcserélési összefüggésekből lehet levezetni. Kapjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_x \mathbf{M}_y - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_x &= \sum_{kl} \{ (\mathbf{p}_{ky} \mathbf{q}_{kz} - \mathbf{q}_{ky} \mathbf{p}_{kz}) (\mathbf{p}_{lx} - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{p}_{lx}) \\ &\quad - (\mathbf{p}_{kz} \mathbf{q}_{kx} - \mathbf{q}_{kz} \mathbf{p}_{kx}) (\mathbf{p}_{ly} - \mathbf{q}_{ly} \mathbf{p}_{ly}) \} = \\ &= \sum_{kl} \{ \mathbf{p}_{ky} \mathbf{q}_{lx} (\mathbf{q}_{kz} \mathbf{p}_{lx} - \mathbf{p}_{lx} \mathbf{q}_{kz}) \\ &\quad + \mathbf{q}_{ky} \mathbf{p}_{lx} (\mathbf{p}_{kz} \mathbf{q}_{lx} - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{p}_{kz}) \} = \\ &= \frac{h}{2\pi i} \sum_k (\mathbf{p}_{kx} \mathbf{q}_{ky} - \mathbf{q}_{kx} \mathbf{p}_{ky}), \end{aligned}$$

azaz

$$\mathbf{M}_x \mathbf{M}_y - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_x = \varepsilon \mathbf{M}_z \quad \left(\varepsilon = \frac{h}{2\pi i} \right). \quad (3)$$

Ebből a képletből egyébként közvetlenül látható, hogy a felületi tétel — éppúgy, mint a klasszikus mechanikában — mindenkor vagy legfeljebb egy vagy mind a három tengelyre érvényes.

A következőkben feltesszük, hogy a szemügyre vett probléma, ha azt az előző fejezetben kifejlesztett módszerekkel tárgyaljuk, *diszkrét* energiaértékekre (pontospektrumra) vezet. Ha valamely *nem-elfajult* rendszer esetében $\dot{\mathbf{M}}_z = 0$ (ez fennáll pl., ha az atomra a z -tengely körül szimmetriával rendelkező erők hatnak), úgy \mathbf{M}_z -nek *átlós mátrixnak* kell lennie; az egyes átlós elemek az atom z -tengelyre vonatkoztatott impulzusmomentumának tekintendők az atom egyes *állapotaiban*. Az elektronok mozgásainak vizsgálata céljából vegyük tekintetbe mindenek előtt, hogy (1)-ből

$$\mathbf{q}_{lz} \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{lz} = 0 \quad (4)$$

következik, ami $M_z(nm) = \delta_{nm} M_{zn}$ folytán a következőt jelenti:

$$q_{lz}(nm)(M_{zn} - M_{zm}) = 0. \quad (5)$$

Látjuk: *Olyan kvantumugrás esetén, amely során az M_z impulzusmomentum megváltozik, a kibocsátott „gömbhullám” „rezgési síkja” merőleges a z -tengelyre.* Kapjuk továbbá:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{lx} &= -\varepsilon \mathbf{q}_{ly}, \\ \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} &= \varepsilon \mathbf{q}_{lx}, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

azaz

$$\left. \begin{aligned} q_{lx}(nm)(M_{zn} - M_{zm}) &= -\varepsilon q_{ly}(nm), \\ q_{ly}(nm)(M_{zn} - M_{zm}) &= \varepsilon q_{lx}(nm). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Az M_z változása nélkül végbemenő kvantumugrások esetében a kibocsátott fény a z -tengellyel párhuzamosan lineárpolarizált. A (7) képletből következik továbbá:

$$\left\{ (M_{zn} - M_{zm})^2 - \frac{h^2}{4\pi^2} \right\} q_{l\eta}(nm) = 0 \quad (\eta = x, y). \quad (8)$$

Levonhatjuk a következtetést: *Minden egyes kvantumugrás során M_{zn} 0-val vagy $\pm \frac{h}{2\pi}$ -vel változik.* Az utóbbi esetben kisugárzott fény (7) szerint cirkulárpolarizált.

Az M_z lehetséges megváltozásaira fent nyert eredmény alapján M_{zn} a következő alakban állítható elő:

$$M_{zn} = \frac{h}{2\pi} (n_1 + C) \quad (n_1 = \dots -2, -1, 0, 1, 2, \dots). \quad (9)$$

Ha léteznének olyan állapotok, amelyek impulzusmomentuma nem illik bele ebbe a sorozatba, úgy ez utóbbiak, valamint a (9) alatt megadottak között nem volna lehetséges átmenet, sem pedig bármiféle kölcsönhatás. A (9) összefüggés alapján n -et két összetevőre bonthatjuk fel, melyek egyike a (9) alatt bevezetett n_1 szám,

míg a másik, melyet n_2 -vel jelölünk, az ugyanazon n_1 -hez tartozó különböző n -eket különbözteti meg. Mátrixaink ekkor négydimenziósak lesznek, és az elektron mozgásaira vonatkozóan nyert eredményeink így foglalhatók össze:

$$q_{lz}(nm) = \delta_{n_1 m_1} q_{lz}(nm); \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} q_{lx}(nm) &= \delta_{1, |n_1 - m_1|} q_{lx}(nm), \\ q_{ly}(nm) &= \delta_{1, |n_1 - m_1|} q_{ly}(nm); \end{aligned} \right\} \quad (10')$$

$$q_{lx}(n_1, n_2; n_1 \pm 1, m_2) \mp i q_{ly}(n_1, n_2; n_1 \pm 1, m_2) = 0. \quad (10'')$$

A (4) és (6) egyenletekből következik továbbá, hogy

$$\mathbf{q}_l^2 \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_z \mathbf{q}_l^2 = 0; \quad (11)$$

itt a $\mathbf{q}_l^2 = \mathbf{q}_{lx}^2 + \mathbf{q}_{ly}^2 + \mathbf{q}_{lz}^2$ jelölést alkalmaztuk.

Ez az összefüggés azt jelenti, hogy \mathbf{q}_l^2 az n_1 „kvantumszámra” nézve átlós mátrix.

A (4–7) és (10), (11) összefüggések akkor is helyesek maradnak, ha \mathbf{q}_{lx} , \mathbf{q}_{ly} , \mathbf{q}_{lz} helyére a

$$\mathbf{p}_{lx}, \mathbf{p}_{ly}, \mathbf{p}_{lz} \quad \text{vagy az} \quad \mathbf{M}_x, \mathbf{M}_y, \mathbf{M}_z$$

mátrixokat helyettesítjük.

Speciálisan fennáll:

$$\left. \begin{aligned} M_x(nm) &= \delta_{1, |n_1 - m_1|} M_x(nm); \quad M_y(nm) = \delta_{1, |n_1 - m_1|} M_y(nm), \\ M_x(n_1, n_2; n_1 \pm 1, m_2) \mp i M_y(n_1, n_2; n_1 \pm 1, m_2) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Átlós alakú továbbá [vö. (1)] az $\mathfrak{M}^2 = \mathbf{M}^2 = \mathbf{M}_x^2 + \mathbf{M}_y^2 + \mathbf{M}_z^2$ mátrix is n_1 -re nézve; fennáll ugyanis:

$$\mathbf{M}^2 \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_z \mathbf{M}^2 = 0. \quad (13)$$

Olyan rendszer esetében, amelyre mind a három felületi tétel érvényes, \mathfrak{M} állandó komponensei bizonyosan nem lehetnek mind átlós mátrixok. Ekkor ugyanis ezen komponensek mindegyikére alkalmazhatnánk a fent az \mathbf{M}_z = átlós mátrixra elvégzett megfontolásokat, ami ellentmondásokra vezetne. Az ilyen rendszer tehát szükségképpen *elfajult*.

Vegyük most szemügyre a $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1 + \dots$ rendszert, mely a következő tulajdonságú: $\lambda = 0$ esetén legyen érvényes mind a három felületi tétel. Ha $\lambda \neq 0$, a rendszer legyen nem-elfajult; \mathbf{M}_z azonban legyen továbbra is állandó. A \mathbf{H}_0 energia független n_1 -től. Az eredmények, melyeket a $\lambda \neq 0$ eset vizsgálata során nyerünk, részben az elfajult \mathbf{H}_0 rendszerre is átvihetők, ti. amennyiben azok függetlenek először a λ -tól, másodszor a z -tengely kitüntetett irányától.

A rendszer $\lambda = 0$ esetén fennálló elfajulása azon keresztül jut kifejezésre, hogy $\dot{\mathbf{M}}_x$, $\dot{\mathbf{M}}_y$, $\frac{d}{dt}(\mathbf{M}^2)$ nem tartalmaz λ -ban nulladrendű (konstans) tagot. Így tehát

$$\left. \begin{aligned} v_0(nm) M_\eta(nm) &= 0 \quad (\eta = x, y); \\ v_0(nm) M^2(nm) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Minthogy \mathbf{W}_0 a korábban bevezetett n_1 kvantumszámtól független, tehát $v_0(n_1, n_2; m_1, m_2) = 0$, míg $v_0(n_1, n_2; m_1, m_2)$ $n_2 \neq m_2$ esetén mindenkor zérustól

különböző, (14)-ből következik:

$$\left. \begin{aligned} M_{\eta}^0(nm) &= \delta_{n_2 m_2} M_{\eta}^0(nm), \\ M^{0^2}(nm) &= \delta_{n_2 m_2} M^{0^2}(nm). \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

A teljes impulzusmomentum négyzete, \mathbf{M}^{0^2} a (13), (15) képletek folytán átlós mátrix. A kettős összeg, mely az $\mathbf{M}_x^0 \mathbf{M}_y^0$ mátrixot állítja elő, egyszeres szummára redukálódik:

$$\left. \begin{aligned} &\sum_{k_1 k_2} M_x^0(n_1 n_2; k_1 k_2) M_y^0(k_1 k_2; m_1 m_2) \\ &= \delta_{n_2 m_2} \sum_{k_1} M_x^0(n_1 n_2; k_1 n_2) M_y^0(k_1 n_2; m_1 n_2), \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

mely tekintettel arra, hogy rögzített n_2 mellett n_1 számára véges számú érték lehetséges ($\mathbf{M}^{0^2} = \mathbf{M}_x^{0^2} + \mathbf{M}_y^{0^2} + \mathbf{M}_z^{0^2} \equiv \mathbf{M}_z^{0^2}$ elemei nem függenek n_1 -től), véges számú tagot tartalmaz. Az \mathbf{M}_x^0 , \mathbf{M}_y^0 , \mathbf{M}_z^0 mátrixokra alkalmazott (3) összefüggésből az n_2 meghatározott értéke mellett adódó egyenleteket összegezhettük n_1 -re; rögzített n_2 mellett kapjuk²²:

$$\sum_{n_1} M_z(n_1 n_2; m_1 n_2) = \sum_{n_1} (n_1 + C) \frac{h}{2\pi} = 0. \quad (17)$$

Ha még tekintetbe vesszük, hogy (12) és (16) szerint a (17) összeg az n_1 -ek minden egyes hiánytalan sorozatára eltűnik, úgy következik, hogy $n_1 + C$ rögzített n_2 mellett lehetséges értékei hiánytalan sorozatot képeznek és *a zérusra nézve szimmetrikusan fekszenek*, tehát szükségképpen vagy *egész számoknak*, vagy *„feles számoknak”* (vagyis a $\dots -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ sorozatba tartozó számoknak) kell lenniök. Ha a z-tengelyre vonatkoztatott M_z momentum számára $(n_1 + C) \frac{h}{2\pi}$ helyett utólag bevezetjük

az irodalomban eddig szokásos $m \frac{h}{2\pi}$ jelölést, úgy megmutattuk tehát, hogy m -re az

$m \rightarrow \begin{cases} m+1 \\ m \\ m-1 \end{cases}$ kiválasztási szabály érvényes, és hogy m vagy „egész”, vagy „feles” szám.

Eredményünk mutatja továbbá, hogy egyes állapotokra vonatkozó tilalmak, amilyenek pl. a hidrogén eddigi elméletében az elektron és a mag összeütközésének kizárására szükségesek voltak, az itt körvonalazott elméletben nem kapnak helyet.

Most — túllépve az (5), (8) egyenleteken — megkíséreljük levezetni az alapegyenletekből a „teljes impulzusmomentum kvantumszáma” vonatkozó kiválasztási elvet is, továbbá a Zeeman-effektusnál fellépő intenzitásokat.

Emlékezzünk vissza e kiválasztási szabályok klasszikus elméletére: Ott csak arra van szükség, hogy bevezessük a koordináta-rendszert, melynek Z -tengelye a teljes impulzusmomentum irányába mutat: az új koordináták használata mellett ugyanazon eredményeket nyerjük \mathfrak{M} -re vonatkozóan, mint előzőleg M_z -re. Szerkesszünk tehát a klasszikus elmélet szellemében eljárva egy ilyen x' , y' , z' koordináta-rendszert. Ahhoz, hogy a z' -tengely a teljes impulzusmomentum irányába

mutasson, minden esetre fenn kell állnia a

$$z' = x \frac{M_x}{M} + y \frac{M_y}{M} + z \frac{M_z}{M}$$

összefüggésnek. (A 0 indexet a következőkben az egyszerűség kedvéért ismét elhagyjuk az impulzusok, koordináták stb. mellől; a számítások mindenütt a $\lambda=0$ határesetre vonatkoznak.) Úgy intézkedhetünk továbbá, hogy az x' -tengely az x, y -síkban fekszdjék. Ezzel mindent rögzítettünk; fennáll:

$$\begin{aligned} x' &= y \frac{M_x}{\sqrt{M_x^2 + M_y^2}} - x \frac{M_y}{\sqrt{M_x^2 + M_y^2}}, \\ y' &= \frac{z(M_x^2 + M_y^2) - xM_zM_x - yM_zM_y}{M\sqrt{M_x^2 + M_y^2}}. \end{aligned}$$

Kísérreljünk meg a kvantummechanikában hasonló eljárást alkalmazni. Vezessük be a következő három mennyiséget:

$$\left. \begin{aligned} Z_l &= q_{lx}M_x + q_{ly}M_y + q_{lz}M_z, \\ X_l &= q_{ly}M_x - M_yq_{lx}, \\ Y_l &= M_xq_{lz}M_x + M_yq_{lz}M_y - q_{lx}M_zM_x - M_yM_zq_{ly}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

A keresett kiválasztási szabályok levezetéséhez szükséges még néhány felcserélési összefüggés, melyek (4)-től és (6)-ból adódnak $\left(\varepsilon = \frac{h}{2\pi i}\right)$:

$$q_{lx}M^2 - M^2q_{lx} = 2\varepsilon(q_{lz}M_y - M_zq_{ly}) \quad (19)$$

és a q_{ly} , q_{lz} mátrixokra vonatkozó, innen ciklikus felcseréléssel adódó egyenletek. Ekkor a (3), (4), (6) és (19) összefüggésekből következik²³:

$$\left. \begin{aligned} X_lM^2 - M^2X_l &= 2\varepsilon Y_l, \\ Y_lM^2 - M^2Y_l &= \varepsilon(X_lM^2 + M^2X_l), \\ Z_lM^2 - M^2Z_l &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Ezek az egyenletek egészen hasonlóak az M_z kiválasztási szabályait meghatározó (4), (6) egyenletekhez; minthogy alább meg fogjuk mutatni, hogy a q_{lx} , q_{ly} , q_{lz} mátrixok valóban kifejezhetők X_l , Y_l , Z_l lineáris függvényei alakjában, $\lambda=0$ mellett időben állandó együtthatókkal, így (20)-ból közvetlenül meghatározhatjuk az M -re érvényes kiválasztási szabályokat. Minthogy M^2 átlós mátrix, (20)-ból következik:

$$\left. \begin{aligned} X_l(nm)(M_m^2 - M_n^2) &= -2\varepsilon Y_l(nm), \\ Y_l(nm)(M_m^2 - M_n^2) &= \varepsilon X_l(nm)(M_m^2 + M_n^2), \\ Z_l(nm)(M_m^2 - M_n^2) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

A (21) egyenletek közül az utolsó kimondja, hogy \mathbf{Z} -ben nem lép fel olyan rezgés, mely M^2 megváltozásának felelne meg. A két első egyenletből következik:

$$X_I(nm) \left\{ (M_m^2 - M_n^2)^2 - \frac{h^2}{2\pi^2} (M_m^2 + M_n^2) \right\} = 0. \quad (22)$$

Legyen most $M_m^2 = \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \left(a_m^2 - \frac{1}{4} \right)$, ahol a_m a kvantumszámok valamely függvényét jelenti; ekkor (22)-ből kapjuk:

$$X_I(nm) ((a_n - a_m)^2 - 1) ((a_n + a_m)^2 - 1) = 0,$$

vagy el nem tűnő $X_I(nm)$ esetén:

$$a_n = \pm a_m \pm 1. \quad (23)$$

Nem jelenti az általánosság korlátozását, ha feltesszük, hogy a_m mindenkor pozitív és $\geq \frac{1}{2}$. Az a_m -ek eszerint $C, 1+C, 2+C, \dots$ alakú sorozatot alkotnak, ahol a C állandó $\geq \frac{1}{2}$. Írjuk: $a_m = j + \frac{1}{2}$; ekkor

$$M^2 = j(j+1) \cdot \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \quad (24)$$

és j -re fennáll a $j \rightarrow \begin{cases} j+1 \\ j \\ j-1 \end{cases}$ kiválasztási szabály.

Ez az eredmény formálisan emlékeztet M^2 -nek a Landé-féle g -formulában szereplő értékeire.

Ha most ismét bevezetjük M_z számára az $m \frac{h}{2\pi}$ jelölést, úgy (12)-ből, valamint az

$$\mathbf{M}^2 = \mathbf{M}_x^2 + \mathbf{M}_y^2 + \mathbf{M}_z^2$$

és

$$(\mathbf{M}_x + i\mathbf{M}_y)(\mathbf{M}_x - i\mathbf{M}_y) = \mathbf{M}_x^2 + \mathbf{M}_y^2 - i\varepsilon\mathbf{M}_z = \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}_z^2 - i\varepsilon\mathbf{M}_z$$

összefüggésekből kiolvasható:

$$\left. \begin{aligned} M_x(j, m-1; j, m) + iM_y(j, m-1; j, m) &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}, \\ M_x(j, m; j, m-1) - iM_y(j, m; j, m-1) &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Az m számnak adott j -hez tartozó maximális m_{\max} értékét az jellemzi, hogy az $m_{\max} \rightarrow m_{\max} + 1$ ugrások nem lépnek fel, azaz: hogy ezekre az ugrásokra pl. a (25) képletek közül az elsőnek a jobb oldala eltűnik. Ebből kapjuk:

$$j = m_{\max}.$$

Eszerint j is csak „egész” vagy „feles” szám lehet.

Az intenzitásképletek levezetése a Zeeman-effektus esetére, azaz a \mathbf{q}_{Ix} , \mathbf{q}_{Iy} , \mathbf{q}_{Iz} mátrixok m -függésének meghatározása immár igen egyszerűnek látszik. A (18)

egyenleteket megoldva a q_{lx} , q_{ly} , q_{lz} mátrixokra kapjuk a

$$\left. \begin{aligned} q_{lz} &= (ZM_z + \varepsilon X_l + Y_l)M^{-2}, \\ q_{lx} + iq_{ly} &= [Z_l - q_{lz}(M_z + i\varepsilon) + iX_l](M_x - iM_y)^{-1}, \\ q_{lx} - iq_{ly} &= [Z_l - q_{lz}(M_z - i\varepsilon) - iX_l](M_x + iM_y)^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

összefüggéseket. Ezek az egyenletek megadják annak — korábban mellőzött — bizonyítását, hogy a q_{lx} , q_{ly} , q_{lz} mátrixok előállíthatók X_l , Y_l , Z_l lineáris függvényei alakjában, melyben az együtthatók $\lambda = 0$ esetén az időtől függetlenek. A (26) egyenletek egyszersmind magukban foglalják a keresett intenzitásképleteket. Ahhoz, hogy ezt belássuk, mindenekelőtt megjegyezzük, hogy az X_l , Y_l , Z_l mátrixok m -ben átlós alakúak. Fennáll ugyanis:

$$\left. \begin{aligned} X_l M_z - M_z X_l &= 0, \\ Y_l M_z - M_z Y_l &= 0, \\ Z_l M_z - M_z Z_l &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Problémánk most két részre válik szét: a $j \rightarrow j$ ugrások és a $j \rightarrow j-1$ ugrások intenzitásának tárgyalására (a $j \rightarrow j+1$ ugrások ekkor nem adnak semmi újat). Targyaljuk először a $j \rightarrow j$ átmeneteket. Ezekhez tartozó elemek (20) szerint csak Z_l -ben lépnek fel. Legyen ezen elemek jele $Z_l(j; m)$. Ekkor $M_z = m \frac{h}{2\pi}$ figyelembe vétele mellett (26)-ból és (24)-ből kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} q_{lz}(j, m) &= \frac{2\pi}{h} Z_l(j, m) \frac{m}{j(j+1)}, \\ (q_{lx} + iq_{ly})(j, m-1; j, m) &= \frac{2\pi}{h} Z_l(j, m-1) \sqrt{\frac{j(j+1)-m(m-1)}{j(j+1)}}, \\ (q_{lx} - iq_{ly})(j, m; j, m-1) &= \frac{2\pi}{h} Z_l(j, m) \sqrt{\frac{j(j+1)-m(m-1)}{j(j+1)}}. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Abból a célból, hogy megkapjuk végül a $Z_l(j, m)$ mennyiség függését m -től, használjuk fel az

$$M_x q_{ly} - q_{ly} M_x = \varepsilon q_{lz} \quad (29)$$

összefüggést; ez esetünkben azt adja, hogy $Z_l(jm)$ nem függ m -től. Ily módon a $j \rightarrow j$ átmenetekre kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} q_{lz}(jm) : (q_{lx} + iq_{ly})(j, m-1; j, m) : (q_{lx} - iq_{ly})(j, m; j, m-1) \\ = m : \sqrt{j(j+1)-m(m-1)} : \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}. \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

Hasonlóan tárgyaljuk a $j \rightarrow j-1$ ugrásokat. Ezekre (21) szerint $X_l(j, m; j-1, m) = \frac{\varepsilon}{j} Y_l(j, m; j-1, m)$. Ha az intenzitásokat (26)-ból $X_l(j, m; j-1, m)$ segítségével

kifejezzük, kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} q_{1z}(j, m; j-1, m) &= i \frac{2\pi}{h} X_1(j, m; j-1, m) \frac{1}{j} \\ (q_{1x} + iq_{1y})(j, m-1; j-1, m) \\ &= i \frac{2\pi}{h} X_1(j, m-1; j-1, m-1) \frac{\sqrt{j-m}}{j\sqrt{j+m-1}}, \\ (q_{1x} - iq_{1y})(j, m; j-1, m-1) \\ &= -i \frac{2\pi}{h} X_1(j, m; j-1, m) \frac{\sqrt{j+m-1}}{j\sqrt{j-m}}. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

Abból a célból, hogy végül meghatározzuk az $X_1(j, m; j-1, m)$ mennyiség függését m -től, használjuk fel ismét a (29) összefüggést, melyből itt egyszerű számításal adódik:

$$X_1(j, m; j-1, m) = A(j, j-1) \sqrt{j^2 - m^2}. \quad (32)$$

Ily módon kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} q_{1z}(j, m; j-1, m) : (q_{1x} + iq_{1y})(j, m-1; j-1, m) : (q_{1x} - iq_{1y})(j, m; j-1, m-1) \\ = \sqrt{j^2 - m^2} : \sqrt{(j-m)(j-m+1)} : - \sqrt{(j+m)(j+m-1)}. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

A $j \rightarrow j+1$ ugrások lényegében ugyanezen intenzitásokat adják; ekkor

$$\left. \begin{aligned} q_{1z}(j, m; j+1, m) : (q_{1x} + iq_{1y})(j, m; j+1, m+1) : (q_{1x} - iq_{1y})(j, m+1; j+1, m) \\ = \sqrt{(j+1)^2 - m^2} : \sqrt{(j+m+2)(j+m+1)} : - \sqrt{(j-m+1)(j-m)}. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

A (30), (33), (34) képletek megegyeznek a korrespondenciaszerű megfontolás útján nyert intenzitásképletekkel²⁴.

Még rá kell mutatnunk a (21) képlet egy egyszerű következményére: A $\Delta j = 0$ ugrások csak a „ Z_1 irány” mentén mennek végbe. Ha a mag körül keringő *egyetlen* elektron mozgását, azaz a hidrogén atom esetét vesszük szemügyre, úgy (1)-ből közvetlenül következik Z eltűnése. Ekkor tehát $\Delta j = 0$ ugrások egyáltalán nem lépnek fel.

2. §. *A Zeeman-effektus.* Ha a \mathfrak{H} mágneses tér által az elektronra kifejtett $(e/c)\mathbf{v} \times \mathfrak{H}$ Lorentz-erőt átvesszük a kvantummechanikába, úgy azonnal magától értetődőnek látszik, hogy az atomok esetében normális Zeeman-effektust nyerünk. Hiszen pontosan ugyanazon feltevések — nevezetesen a \mathfrak{H}^2 -et tartalmazó tagok elhanyagolása — mellett, ameyek mellett a klasszikus elméletben a Larmor-tétel a maggal rendelkező atomra levezethető, itt is kiadódik *Larmor tétele*. Ennek ellenére bizonyos különbség áll fenn a kvantummechanika és a klasszikus elmélet között \mathfrak{H}^2 elhanyagolásának jogos voltát illetően. A klasszikus elméletben \mathfrak{H}^2 elhanyagolása a kis méretű pályák esetében bizonyosan megengedett, igen nagy pályákra vagy éppen hiperbolapályákra pedig bizonyosan *nem* megengedett. A kvantummechanikában mindezek a pályák — a messze kint elhelyezkedők csakúgy mint a legbelső — a kvantummechanikára jellemző sajátos kinematika folytán oly szoros

kapcsolatban állnak egymással, hogy \mathfrak{H}^2 elhanyagolásának jogos volta egyáltalán nem világos minden további nélkül. Hiszen magából az alapállapotból a szabad elektronállapotokba vezető átmenetek valószínűségei is jelentékenyek.

Az oszcillátor esetében bizonyos, hogy normális Zeeman-effektus lép fel; maggal rendelkező atom esetében ezzel szemben nem látszik teljesen kizártnak, hogy a messze kint és a legbelül fekvő pályák között fennálló szoros kapcsolat olyan eredményekre vezet, amelyek a normális Zeeman-effektustól bizonyos mértékig eltérnek. Ki kell azonban emelnünk: súlyos érvek sora szól az anomális Zeeman-effektus ezen az alapon történő értelmezésének lehetősége ellen. Inkább talán azt lehet majd remélni, hogy az Uhlenbeck—Goudsmit-féle feltevés (vö. 37. old.) később lehetővé teszi majd a mondott jelenségek kvantitatív leírását.

3. §. *Csatolt harmonikus rezonátorok. Hullámterek statisztikája.* Az elgondolható legegyszerűbb több szabadsági fokú rendszer a csatolt harmonikus oszcillátorok

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^f \frac{\mathbf{p}_k^2}{m_k} + \mathbf{Q}(\mathbf{q}) \quad (35)$$

által megadott rendszere, ahol $\mathbf{Q}(\mathbf{q})$ a koordináták kvadratikus alakja (melyben az együtthatók *számok*). Amint azt a 2. fej. 1. §-ban megállapítottuk, a felcserélési szabályok a koordináták és az impulzusok egyidejű ortogonális transzformációja-kor invariánsak maradnak. Ennek folytán a (35) rendszer, ugyanúgy mint a klasszikus elméletben, *kölcsönhatásmentes* oszcillátorok rendszerébe transzformálható. Speciálisan valamely kristályrács rezgéseit — mint a klasszikus elméletben — fel kell bontanunk *sajátrezgésekre*. Minden egyes sajátrezgést, amint azt korábban részletesen kifejtettük, egyszerű lineáris oszcillátorként kell kezelnünk, és a kölcsönhatásmentes oszcillátorok összességét a 2. fej. 1. § fejtegetéseinek megfelelően kell egyetlen rendszerré egyesítenünk. Ez akkor is érvényes marad, ha a végtelen sok szabadsági fokú rendszer határesetére térünk át és mondjuk egy kontinuumként idealizált rugalmas test vagy végül egy *elektromágneses üreg* rezgéseit vesszük szemügyre.

Valamely elektromágneses üreg rezgéseit az eddigi kvantumelméletben is gyakran képezték beható tanulmány tárgyát. Hiszen egyrésztől itt éppen az eddigi módzerekkel tárgyalható, elgondolható legegyszerűbb problémával: a harmonikus oszcillátorral van dolgunk; másrésztől az ismert eredmény, mely szerint valamely sajátrezgés energiájának $h\nu$ egész számú többszörösével kell egyenlőnek lennie, formális hasonlóságot mutat a fénykvantumok elméletének feltevéseivel, így remény volt rá, hogy az üregsugárzás tárgyalása útján bepillantást lehet nyerni a fénykvantumok lényegébe. Minden esetre kezdettől fogva világos, hogy a fénykvantumok problémáinak az imént vázolt megközelítése e probléma leglényegesebb vonatkozásáról, az egymástól távol elhelyezkedő atomok csatolásának jelenségéről semmi esetre sem tud számot adni. Ez a probléma ugyanis az üreg rezgéseire vonatkozó kérdésfeltevésben egyáltalán nem kap helyet. Mindazonáltal az üreg sajátrezgéseit és a fénykvantumok között — ha egyszer az utóbbiak létezését posztuláltuk — olyan szoros megfeleltetés létesíthető, hogy az üregben lehetséges sajátrezgések bármely *statisztikájának* a fénykvantumok meghatározott *statisztikája* felel meg és megfordítva.

Debye²⁵ megkísérelte, hogy az egyes fénykvantumokat az üreg sajátrezgéseire elosztva ilyen statisztikát adjon meg, s így módon sikerült neki a Planck-féle képletet levezetni. Számunkra úgy látszik azonban, hogy a hullámelméleti és a fénykvantumokkal kapcsolatos fogalmak ilyen elegyítése aligha felel meg a probléma lényegének. Ehelyett úgy véljük, hogy az a következetes eljárás, ha a probléma hullámelméleti oldalát teljesen elváltaszttjuk a fénykvantumok elméletétől, ha tehát az üregsugárzás hullámelméleti statisztikáját az általános — a kvantumelméleti atomrendszerekre érvényes — statisztikai törvényeknek megfelelően tárgyaljuk. A megfelelő fénykvantumstatisztika ekkor, mint azt meg fogjuk mutatni, a Bose-statisztika²⁶; ez az eredmény természetesnek látszik, minthogy ennek a statisztikának itt nincs semmi köze a független fényrészcskékre vonatkozó feltevéshez, hanem azt mint a sajátrezgések statisztikájának következményét kell felfognunk — ami mutatja, hogy éppen a statisztikusan független fényrészcskék feltételezése nem volna helytálló.

Az eddigi kvantumelméletben az üregsugárzás minden ilyen fajta tárgyalásával kapcsolatban felmerült az az alapvető nehézség, hogy a Planck-féle sugárzási törvény kiadódott ugyan, de az adott részterfogatban foglalt energia ingadozásának négyzetes középértékére nem a helyes érték adódott. Azt találjuk tehát, hogy valamely mechanikai rendszer vagy egy elektromágneses üreg sajátrezgéseinek következetes tárgyalása az eddigi elméletben a legsúlyosabb ellentmondásokra vezet. Azt reméltük ezért, hogy a módosított kinematika, mely az itt kifejtett elmélet alapjául szolgál, az interferenciaingadozásokra a helyes értéket szolgáltatja, úgyhogy a mondott ellentmondások eltűnnek és lehetőség nyílik arra, hogy megadjuk az üregsugárzás következetes statisztikáját.

Az oszcillátorok rendszerének állapotai az egyes oszcillátorok n_1, n_2, n_3, \dots „kvantumszámaival” jellemezhetők oly módon, hogy az egyes állapotok energiáját egy additív állandótól eltekintve

$$E_n = h \sum_k \nu_k n_k \quad (36)$$

adja meg. Az additív állandó, a „*zéruspontenergia*”

$$C = \frac{1}{2} h \sum_k \nu_k \quad (36')$$

(ez speciálisan végtelen sok szabadsági fok határesetében végtelen nagy volna). Az E_n mennyiséget a következőkben röviden *termikus energiának* fogjuk nevezni. Az I. részben mondottak értelmében a rendszer minden egyes, meghatározott n_1, n_2, n_3, \dots értékrendszerrel jellemzett állapotának egyenlő statisztikus súlyt tulajdonítunk. Az ebből adódó következtetések közvetlenül láthatók a következő megjegyzés alapján:

Ha valamely s -dimenziós, $V = l^s$ nagyságú izotróp térrészben ν fázissebességgel hullámok terjednek tova, úgy a $d\nu$ frekvenciatartományhoz tartozó *sajátrezgések* száma egyenlő a $d\nu$ -höz a Bose—Einstein-féle értelemben tartozó „*cellák*” számával; ez tetszőleges s -re érvényes, pl. rezgő *membránokra* vagy *húrokra* is. Ha ugyanis a polarizációs tulajdonságoktól stb. eltekintünk, a $d\nu$ -höz tartozó sajátrezgések számát úgy kaphatjuk meg, hogy választ keresünk a kérdésre: hányféle-

képpen választhatók az m_1, \dots, m_s pozitív egész számok oly módon, hogy a

$$\frac{2l}{v} \cdot v = \sqrt{m_1^2 + \dots + m_s^2}$$

összefüggésből meghatározott v a dv közbe essék. Jelölje az a sugarú, s dimenziós gömb térfogatát $K_s(a)$; ekkor a v -nél kisebb rezgésszámú sajátrezgések száma $\frac{V}{v^s} K_s(v)$. Másrészt a dv -höz tartozó cellák számát a következőképpen határozhatjuk meg: A kvantum p_1, \dots, p_s impulzuskomponensei a

$$\frac{hv}{v} = \sqrt{p_1^2 + \dots + p_s^2}$$

egyenletnek tesznek eleget, és a $2s$ -dimenziós fázistér celláinak nagysága h^s . Ebből látható, hogy a v -nél kisebb frekvenciájú cellák száma $\frac{V}{v^s} K_s(v)$ -vel egyenlő.

Így tehát, amint azt fent említettük, a cellák és a sajátrezgések között egyértelmű megfeleltetés létesíthető oly módon, hogy a megfeleltetésben szereplő egyes párok mindenkor ugyanazon dv -höz tartozzanak. Elérhető ezenkívül az is, hogy valamely sajátrezgés, valamint a hozzárendelt cellába eső fénykvantumok *iránya* ugyanazon infinitezimális szögtartományba essék. Ekkor (36) szerint valamely *oszcillátor* kvantumszámát a *megfelelő cellába eső* kvantumok számával kell egyenlővé tenni. A fénykvantumok számára valamely statisztikát választva megkapjuk a sajátrezgések ehhez hozzárendelt statisztikáját és megfordítva. Látjuk, hogy az oszcillátorrendszer állapotainak súlyaira vonatkozóan fent tett kijelentés ezzel a hozzárendeléssel közvetlenül átmegy a Bose—Einstein statisztikai alapfeltevésbe. Az egyenlő valószínűségű komplexiókat *azzal definiáljuk, hogy megmondjuk, az egyes cellákban hány kvantum foglal helyet*²⁷.

A Debye-féle statisztika szerint az r -kvantumos oszcillátorok száma (egy csak v -től függő tényezőtől eltekintve)

$$\frac{1}{r} e^{-r \frac{hv}{kT}} \quad (37)$$

s a Planck-törvényre a

$$\sum_{r=1}^{\infty} e^{-r \frac{hv}{kT}} = \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}$$

módon jutunk; nem kielégítő egyébként, hogy (37) csak $r > 0$ esetén érvényes és nem adja meg a nulla-kvantumos oszcillátorok számát. Az új felfogásnak megfelelően (37) helyére Bose szerint az

$$\left(1 - e^{-\frac{hv}{kT}}\right) e^{-r \frac{hv}{kT}} \quad (38)$$

kifejezés²⁸ lép, mely a fénykvantumok elméletének nyelvén szólva az „ r -szeresen betöltött cellák” számát adja meg; a Planck-képletre a

$$\sum_{r=0}^{\infty} r \left(1 - e^{-\frac{hv}{kT}}\right) e^{-r \frac{hv}{kT}} = \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}$$

módon jutunk. A rezgések Debye-féle statisztikájához hozzárendelt fénykvantum-statisztika a *Wolfke*²⁹ és *Bothe*³⁰ kidolgozta elméletben nyert megfogalmazást. Mindenesetre ezek a szerzők nem r -szeresen betöltött cellákról beszélnek, hanem (37)-et az „ r -kvantumos fénykvantum-molekulák” számának nevezik.

A klasszikus hullámelmélet említett elégtelensége, mint ismeretes, a sugárzási tér energiaingadozásainak vizsgálata során a következő módon kerül napvilágra. Tegyük fel, hogy valamely szűk $\nu, \nu + d\nu$ tartomány hullámai akadálytalanul közlekedhetnek a V térfogat és valamely igen nagy térfogat között, míg az összes többi hullámra nézve e térfogatok el vannak egymástól választva, legyen továbbá E a ν rezgésszámú hullámok energiája V -ben; ekkor a $\overline{\Delta^2} = (\overline{E} - \overline{E})^2$ négyzetes ingadozás *Einstein* nyomán a Boltzmann-elv megfordításával számítható ki. Ha $z_\nu d\nu$ a $d\nu$ -höz tartozó sajátrezgések (cellák) térfogategységre vonatkoztatott száma, s így fennáll:

$$\overline{E} = \frac{z_\nu h\nu}{e^{kT} - 1} V, \quad (39)$$

úgy kapjuk:

$$\overline{\Delta^2} = h\nu \overline{E} + \frac{\overline{E}^2}{z_\nu V}. \quad (40)$$

Ha azonban az energiaingadozásokat a hullámtér *interferenciáiból* számítjuk ki, úgy a klasszikus elmélet, mint azt *Lorentz*³¹ részletes számításai mutatják, csak (40) második tagját adja. Ez az ellentmondás természetesen egészen általánosan fennáll pl. valamely kristályrácsban vagy rugalmas kontinuumban kialakuló hullámokra is. Ennek okát *Ehrenfest*³² szerint abban kell keresnünk, hogy *Einstein* megfontolása során feltételezte a V -hez, valamint a nagy térfogathoz tartozó *entrópia additív jellegét*. A sajátrezgések klasszikus elmélete szerint azonban az entrópia additivitása csak a Rayleigh—Jeans törvény érvényességi tartományában áll fenn. Az, hogy az általános esetben a résztérfogatok statisztikus függetlensége nem teljesül, oly természetellenes eredménye az üreksugárzás eddigi elméletének, hogy már a legegyszerűbb probléma, a harmonikus oszcillátor esetében ezen elmélet alkalmazhatatlanságára kell következtetnünk.

Számítsuk ki most a $\overline{\Delta^2}$ négyzetes ingadozást az interferenciákból a kvantum-mechanika szerint. A dolog lényegét nem érintő számítási bonyadalmak elkerülése érdekében foglalkozzunk az elgondolható legegyszerűbb esettel, ti. egy kifeszített *rezgő húrral*. A számítás minden lényeges pontja minden további nélkül átvihető egyébként általánosabb esetekre. Foglalkozzunk először a klasszikus tárgyalással.

A húr hossza legyen l , $u(x, t)$ pedig az oldalirányú kitérés. Bevezetve az

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) \sin k \frac{\pi}{l} x, \quad (41)$$

vagy az

$$q_k(t) = \frac{2}{l} \int_0^l u(x, t) \sin k \frac{\pi}{l} x \cdot dx \quad (41')$$

képlettel megadott $q_k(t)$ Fourier-együtthatókat mint koordinátákat, a húr energiája

négyzetösszeg alakját ölti. Alkalmasságértékelés mellett írható ugyanis:

$$H = \frac{1}{2} \int_0^l \left\{ u^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\} dx = \frac{l}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \dot{q}_k(t)^2 + \left(k \frac{\pi}{l} \right)^2 q_k(t)^2 \right\}. \quad (42)$$

Általánosabban a húr $(0, a)$ szakaszának E energiájára kapjuk:

$$E = \frac{1}{2} \int_0^a \sum_{j,k=1}^{\infty} \left\{ \dot{q}_j \dot{q}_k \sin j \frac{\pi}{l} x \sin k \frac{\pi}{l} x + \right. \\ \left. + q_j q_k j k \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 \cos j \frac{\pi}{l} x \cos k \frac{\pi}{l} x \right\} dx. \quad (43)$$

Ha (43) alatt kiválasztjuk a $j=k$ -hoz tartozó tagokat, úgy — határozottan feltételezve, hogy a szóba jövő hullámhosszak a -hoz viszonyítva kicsinyek — éppen az $\frac{a}{l} H$ értéket kapjuk. Ebből látjuk: A

$$\Delta = E - \bar{E}$$

különbség, ahol a felülvonás a

$$q_k = a_k \cos(\omega_k t + \varphi_k); \quad \omega_k = k \frac{\pi}{l} \quad (44)$$

kifejezésben szereplő fázisokra vonatkozó átlagolást jelent, (43)-ból oly módon kapható meg, hogy elhagyjuk a $j=k$ -hoz tartozó tagokat. Ez a fázisátlag az idő-átlaggal azonos. Elvégezve az integrálást kapjuk:

$$\Delta = \frac{1}{4} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \left\{ \dot{q}_j \dot{q}_k K_{jk} + j k q_j q_k \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 K'_{jk} \right\}, \quad (45)$$

ahol

$$\left. \begin{aligned} K_{jk} &= \frac{\sin(j-k) \frac{\pi}{l} a}{(j-k) \frac{\pi}{l}} - \frac{\sin(j+k) \frac{\pi}{l} a}{(j+k) \frac{\pi}{l}} \\ &= \frac{\sin(\omega_j - \omega_k) a}{\omega_j - \omega_k} - \frac{\sin(\omega_j + \omega_k) a}{\omega_j + \omega_k}, \\ K'_{jk} &= \frac{\sin(j-k) \frac{\pi}{l} a}{(j-k) \frac{\pi}{l}} + \frac{\sin(j+k) \frac{\pi}{l} a}{(j+k) \frac{\pi}{l}} \\ &= \frac{\sin(\omega_j - \omega_k) a}{\omega_j - \omega_k} + \frac{\sin(\omega_j + \omega_k) a}{\omega_j + \omega_k}. \end{aligned} \right\} \quad (45')$$

A \bar{A}^2 négyzetes középértéket a későbbi kvantummechanikai számításra tekintettel részletesen felírjuk. Írható:

$$A^2 = (A_1 + A_2)^2 = A_1^2 + A_2^2 + A_1 A_2 + A_2 A_1 \quad (46)$$

ahol

$$A_1^2 + A_2^2 = \frac{1}{16} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \sum_{\substack{l,\kappa=1 \\ l \neq \kappa}}^{\infty} \left\{ \dot{q}_j \dot{q}_k \dot{q}_l q_{\kappa} K_{jk} K_{l\kappa} \right. \quad (46')$$

$$\left. + jk l \kappa \left(\frac{\pi}{l} \right)^4 q_j q_k q_l q_{\kappa} K'_{jk} K'_{l\kappa} \right\};$$

$$A_1 A_2 + A_2 A_1 = \frac{1}{16} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \sum_{\substack{l,\kappa=1 \\ l \neq \kappa}}^{\infty} \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 \left\{ jk q_j q_k q_l \dot{q}_{\kappa} K'_{jk} K_{l\kappa} \right. \quad (46'')$$

$$\left. + l \kappa \dot{q}_j \dot{q}_k q_l q_{\kappa} K_{jk} K'_{l\kappa} \right\}.$$

A (44) összefüggésből $\overline{A_1 A_2 + A_2 A_1} = 0$ következik és így

$$\bar{A}^2 = \bar{A}_1^2 + \bar{A}_2^2 = \frac{1}{8} \sum_{j,k=1}^{\infty} \left\{ \bar{q}_j^2 \bar{q}_k^2 K_{jk}^2 + j^2 k^2 \left(\frac{\pi}{l} \right)^4 \bar{q}_j^2 \bar{q}_k^2 K_{jk}^{\prime 2} \right\}. \quad (47)$$

Ha a húr l hosszára igen nagy értékeket engedünk meg, úgy az ω_k -k (44) szerint egyre sűrűbben helyezkednek el, úgyhogy a (47) összeg integrálba megy át:

$$\bar{A}^2 = \bar{A}_1^2 + \bar{A}_2^2 = \frac{1}{8} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d\omega_j d\omega_k \frac{l^2}{\pi^2} \left\{ \bar{q}_j^2 \bar{q}_k^2 K_{jk}^2 + j^2 k^2 \left(\frac{\pi}{l} \right)^4 \bar{q}_j^2 \bar{q}_k^2 K_{jk}^{\prime 2} \right\}. \quad (47')$$

Végezetül az a „térfogatot” is igen nagyra választjuk és felhasználjuk a

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a} \int_{-\Omega}^{\Omega'} \frac{\sin^2 \omega a}{\omega^2} f(\omega) d\omega = \pi f(0) \quad (\Omega, \Omega' > 0) \quad (48)$$

relációt.

Ekkor látjuk, hogy (45)-ben csak az elsőként álló $\frac{\sin(\omega_j - \omega_k)a}{\omega_j - \omega_k}$ tagok adnak tekintetbe jövő járulékot; (47')-ből kapjuk:

$$\bar{A}^2 = \frac{al}{8\pi} \int_0^{\infty} d\omega \{ (\bar{q}_{\omega}^2)^2 + (\omega^2 \bar{q}_{\omega}^2)^2 \}. \quad (49)$$

Másrésről a közepes energia az a térfogatban (42) szerint

$$\bar{E} = \frac{a}{l} \cdot \frac{l}{4} \int_0^{\infty} d\omega \frac{l}{\pi} \{ \bar{q}_{\omega}^2 + \omega^2 \bar{q}_{\omega}^2 \} = \frac{al}{4\pi} \int_0^{\infty} d\omega \{ \bar{q}_{\omega}^2 + \omega^2 \bar{q}_{\omega}^2 \}. \quad (50)$$

Itt fennáll

$$\overline{\dot{q}_\omega^2} = \omega^2 \overline{q_\omega^2}; \quad (51)$$

itt mindjárt emlékeztetünk rá, hogy ez az összefüggés az I. fej. szerint a kvantummechanikában érvényes marad. Térjünk át most a (39), (40) alatt használt $\overline{A^2}$, \overline{E} mennyiségekre; ehhez (49)-nek és (50)-nek a $dv = \frac{d\omega}{2\pi}$ frekvenciaközre eső járulékát kell vennünk és ezt osztanunk kell dv -vel. Ekkor $V=a$ mellett kapjuk:

$$\overline{A^2} = \frac{\overline{E^2}}{2V}. \quad (52)$$

A (44) képletből látható, hogy esetünkben $z_v = 2$ ugyanis

$$d\omega_k = 2\pi dv_k = \frac{\pi}{l} dk.$$

Ennek folytán tehát (52) valóban (40) második tagját szolgáltatja.

A kvantummechanikára áttérve (41), (41'), (42), (43) az \mathbf{u} , \mathbf{H} , \mathbf{q} , \mathbf{E} mennyiségekre vonatkozó mátrixegyenleteknek tekintendők. Az x azonban szám marad; ha ugyanis a folytonos húr helyett rugalmas *pontsort* veszünk szemügyre, úgy x az egyes pontoknak a (rácsállandóval szorzott) *sorszámát* jelenti.

A \mathbf{q}_k mátrix $2f$ -dimenziós, ahol f a sajátrezgések száma; rugalmas húr esetén \mathbf{q}_k tehát végtelen dimenziós. A \mathbf{q}_k mátrix $q_k(nm)$ elemei mind eltűnnek kivéve ha

$$n_j - m_j = 0 \quad (j \neq k), \quad (53)$$

$$n_k - m_k = \pm 1.$$

Valamely mátrix fázisátlaga az az átlós mátrix, mely a szóban forgó mátrix főátlójával egyenlő. Az (53) képletből részben hasonló következtetéseket vonhatunk le, mint (44)-ből. A megfontolások, melyek korábban a (46), (46'), (46'') képletekre vezettek, a kvantummechanikában is érvényesek maradnak. A $\overline{\Lambda_1^2 + \Lambda_2^2}$ átlós mátrixra is érvényesek a (47), (47') képletek, ahol a \mathbf{q}_k -k mátrixok, s végül ha $\overline{A^2}$ adott v -höz tartozó részét $\overline{A^2}$ -tel jelöljük, (52)-nek megfelelően kapjuk:

$$\overline{A_1^2 + A_2^2} = \frac{\overline{E^{*2}}}{2V}. \quad (52')$$

Itt (49), (50), (51) szerint E^* többé nem az átlagos *termikus* energia, hanem ennek és a *zéruspontenergiának* az összege; az oszcillátorra vonatkozó elemi képletek értelmében

$$\overline{E^*} = h\nu \cdot V + \overline{E},$$

$$\overline{A_1^2 + A_2^2} = \frac{1}{2} (h\nu)^2 V + h\nu \overline{E} + \frac{\overline{E^2}}{2V}; \quad (54)$$

a dv -re eső zéruspontenergia ugyanis

$$\frac{V}{l} \cdot \frac{h\nu}{2} \cdot l z_v dv = h\nu \cdot V dv.$$

Még $\Delta_1 \Delta_2 + \Delta_2 \Delta_1$ -et kell szemügyre vennünk. Ha ezt a mennyiséget pontosan úgy kezeljük, mint $\Delta_1^2 + \Delta_2^2$ -et, (49)-nek megfelelően a

$$\overline{\Delta_1 \Delta_2 + \Delta_2 \Delta_1} = \frac{al^2}{8\pi} \int_0^\infty d\omega \cdot \omega^2 \{(\mathbf{q}_\omega \dot{\mathbf{q}}_\omega)^2 + (\dot{\mathbf{q}}_\omega \mathbf{q}_\omega)^2\}$$

kifejezést kapjuk. Minthogy (42) szerint az $l/2$ mennyiség a rezonátorok „tömegének” tekintendő, a felcserélési összefüggésekből kapjuk:

$$-\mathbf{q}_j \dot{\mathbf{q}}_j(nn) = \dot{\mathbf{q}}_j \mathbf{q}_j(nn) = \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{l} \cdot \frac{h}{2\pi i} = \frac{h}{2l\pi i}.$$

Ennek folytán $\Delta_1 \Delta_2 + \Delta_2 \Delta_1$ dv -höz tartozó részére, $\overline{\Delta_1 \Delta_2 + \Delta_2 \Delta_1}$ -re dv -vel való osztás után kapjuk:

$$\overline{\Delta_1 \Delta_2 + \Delta_2 \Delta_1} = -\frac{1}{2} (h\nu)^2 V$$

és (54) tekintetbe vételével valóban következik:

$$\overline{A^2} = h\nu \overline{E} + \frac{\overline{E^2}}{z_v V}. \quad (55)$$

ami (40)-nel megegyezik.

Ha megfontoljuk, hogy az itt tárgyalt kérdés mégiscsak meglehetősen távol áll azoktól a problémáktól, amelyek vizsgálatából a kvantummechanika kinőtt, úgy az (55) alatt nyert eredményt különösen bátorítónak tekinthetjük az elmélet további kiépítésére.

Ehrenfest fent említett eredménye értelmében az ingadozásoknak az interferencián alapuló kiszámítását megtakaríthatnánk — és ugyanakkor megbizonyosodhatnánk arról is, hogy más hasonló kérdések feltevésénél sem lehetséges ellentmondás — ha a hullámterek kvantummechanikájában közvetlenül be tudnánk bizonyítani a résztérfogatok entrópiájának additivitását. Fent nyert eredményünk alapján várható, hogy az additivitás valóban általánosan fennáll.

Az okok, melyek (55) azon tagjának felléptét eredményezik, amely a klasszikus elméletből nem adódott ki, nyilvánvalóan szoros rokonságban vannak a zéruspontenergia felléptének okaival. A lényeges különbség az itt körvonalazott, valamint az eddigi elmélet között mindkét esetben nem a mechanikai törvények különbségében rejlik, hanem az elméletre jellemző kinematikában. Az (55) képletben, melyben egyáltalán semmilyen mechanikai elv nem játszik szerepet, éppen a kvantumelméleti és az eddigi kinematika különbözőségének egyik legszemléletesebb példáját ismerhetjük fel.

Ha az itt körvonalazott kvantummechanika lényeges vonásait illetően máris helyesnek bizonyulna, úgy egészen általánosan éppen ezt kellene az eddigi elmélethez

képest elért legfontosabb előrehaladásnak tekintenünk: ebben az elméletben a kinematika és a mechanika ismét oly szoros kapcsolatba kerültek, mint mondjuk a klasszikus elmélet kinematikája és mechanikája, és hogy az alapvető új szempontok, melyek a kvantumelmélet alapposztulátumaiból a mechanikai fogalmakra s a tér és idő fogalmára vonatkozóan következnek, a kinematikában csakúgy mint a mechanikában s a kinematika és a mechanika kapcsolatában adekvát kifejezésük nyerne.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

¹ W. Heisenberg, ZS. f. Phys. 33, 879, 1925; Magyar Fizikai Folyóirat 13, 447, 1965. M. Born és P. Jordan, ZS. f. Phys. 34, 858, 1925; Magyar Fizikai Folyóirat 13, 529, 1965. Az utóbbi munkára az „I. rész” megjelöléssel hivatkozunk.

² Megjegyzés korrekturánál. P. Dirac időközben megjelent munkájában (Proc. Roy. Soc. London 109, 642, 1925) tőlünk függetlenül megadott néhányat az I. részben és ebben a dolgozatban foglalt törvényszerűségek körül és az elméletből adódó további új következtetéseket közölt.

³ N. Bohr, ZS. f. Phys. 34, 142, 1925.

⁴ G. Uhlenbeck és S. Goudsmit, Naturwiss. 13, 953, 1925.

⁵ A. Einstein, Phys. ZS. 10, 185, 817, 1909.

⁶ Vö. az I. résszel.

⁷ Ténylegesen az I. részben H energiafüggvényként nem engedtünk meg tetszőleges

$$H^* = \sum a_{sr} p^s q^r$$

alakú függvényt; H^* -ot azzal a szimmetrizált függvénnyel helyettesítettük, amely ugyanazon Hamilton-féle egyenleteket szolgáltatja:

$$H = \sum a_{sr} \frac{1}{s+1} \sum_{l=0}^s p^{s-l} q^r p^l.$$

Az ilyen szimmetrizált H függvényekre az I. részben levezetett képletek értelmében fennáll:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p} &= \sum a_{sr} \frac{1}{s+1} \left\{ \sum_{l=0}^{s-1} (s-l) p^{s-1-l} q^r p^l + \sum_{l=1}^s l p^{s-l} q^r p^{l-1} \right\} \\ &= \sum a_{sr} \sum_{l=0}^{s-1} p^{s-1-l} q^r p^l = \frac{\partial H}{\partial p}; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \sum a_{sr} \frac{r}{s+1} \sum_{l=0}^s p^{s-l} q^{r-1} p^l = \sum a_{sr} \sum_{j=0}^{r-1} q^{r-1-j} p^s q^j = \frac{\partial H}{\partial q}.$$

⁸ A mozgásegyenletek csupán annyit mondanak, hogy ennek a különbségnek átlós mátrixnak kell lennie.

⁹ Vegyük itt tekintetbe az $(\tilde{a}\tilde{b}) = \tilde{b}\tilde{a}$ szabályt.

¹⁰ H. A. Kramers, Nature 113, 673, 1924; 114, 310, 1924. Vö. még: R. Ladenburg, ZS. f. Phys. 4, 451, 1921; R. Ladenburg és F. Reiche, Naturwiss. 11, 584, 1923.

¹¹ M. Born, ZS. f. Phys. 26, 379, 1924.

¹² H. A. Kramers és W. Heisenberg, ZS. f. Phys. 31, 681, 1925.

¹³ W. Pauli, Verhandl. d. dän. Akad. d. Wiss. (megjelenőben).

¹⁴ Itt egy pillanatra előlegezzük a következő fejezetnek a több szabadsági fokkal rendelkező rendszerekre vonatkozó eredményeit.

¹⁵ Vö. a $v_0=0$ esetre kapott eredmények diszkussziájával a 43. oldalon.

¹⁶ Vö. a következő munkákkal: W. Kuhn, ZS. f. Phys. 33, 408, 1925; W. Thomas, Naturwiss. 13, 627, 1925; F. Reiche és W. Thomas, ZS. f. Phys. 34, 510, 1925.

¹⁷ Ezen összefüggések fizikai jelentését a diszperzióelméletben *H. A. Kramers* tárgyalja (Physica, 1925. dec.).

¹⁸ Az analóg eseteket a klasszikus mechanikában *M. Born* és *W. Heisenberg* tárgyalta (Ann. d. Phys. 74, 1, 1924).

¹⁹ A transzformált alak együtthatóit azért jelöljük W_n -nel, mert azok a kvantumdinamikában az energiát jelentik.

²⁰ A végtelen sok változás kvadratikuss (ill. hermitikus) alakok elméletét eddig főként az ilyen alakok egy speciális osztályára (a „korlátos” alakokra) fejlesztették ki (*D. Hilbert*, Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen; *E. Hellinger*, Crelles Journ. 136, 1, 1910). Itt azonban éppen nem korlátos alakokkal van dolgunk. Mégis feltehetjük, hogy a tételek nagyjából ugyanúgy hangzanak.

²¹ Véges alakok esetében a sajátértékek egy algebrai egyenlet gyökei. Ilyenkor és korlátos végtelen alakok esetében is a gyököket pl. *Graeffe* és *Bernoulli* eljárásával határozhatjuk meg; lásd pl. *R. Courant* és *D. Hilbert*, Methoden der mathematischen Physik I, 3. §, 14–15 old. Berlin, Springer, 1924.

²² Arra a tényre, hogy véges $D(\mathbf{ab})$ átlósösszeg esetén mindenkor $D(\mathbf{ab}) = D(\mathbf{ba})$, már az I. részben felhívtuk a figyelmet.

²³ A (20) képletek közül az első és a harmadik egészen egyszerű számításból adódik. A második egyenlet ekkor a következőképpen vezethető le. A (18) képlet értelmében fennáll:

$$\mathbf{Y}_l = \mathbf{M}_x \mathbf{q}_{lz} \mathbf{M}_x + \mathbf{M}_y \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_y - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly}.$$

Felhasználva (6)-ot kapjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_l &= \mathbf{q}_{lz} (\mathbf{M}_x^2 + \mathbf{M}_y^2) - \varepsilon \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_x + \varepsilon \mathbf{M}_y \mathbf{q}_{lx} + \varepsilon^2 \mathbf{q}_{lz} \\ &\quad - \mathbf{q}_{lx} (\mathbf{M}_z \mathbf{M}_x - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly}) \\ &= \mathbf{q}_{lz} (\mathbf{M}^2 - \mathbf{M}_z^2) - \varepsilon \mathbf{X}_l + \varepsilon^2 \mathbf{q}_{lz} - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly}. \end{aligned}$$

Az $\mathbf{Y}_l \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}^2 \mathbf{Y}_l$ különbség kiszámításához vegyük tekintetbe, hogy \mathbf{M}^2 az \mathbf{M}_x , \mathbf{M}_y , \mathbf{M}_z komponensekkel felcserélhető. Az \mathbf{Y}_l -re fent felírt képlet második részére vonatkozóan adódik tehát:

$$\begin{aligned} (\mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x + \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly}) \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}^2 (\mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x + \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly}) &= \quad (\text{vö. [19]}) \\ = 2\varepsilon (\mathbf{q}_{lz} \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x - \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x + \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x \mathbf{q}_{ly}). \end{aligned}$$

A felcserélési összefüggésekből következik továbbá, ha tekintetbe vesszük, hogy (19) szerint $\mathbf{q}_{lz} \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}^2 \mathbf{q}_{lz} = 2\varepsilon \mathbf{X}_l$:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{lz} \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x - \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x \mathbf{q}_{ly} &= \varepsilon (\mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x), \\ \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_z - \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x &= -\mathbf{X}_l \mathbf{M}_z^2 - \varepsilon (\mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} \mathbf{M}_y - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_x \mathbf{M}_z), \end{aligned}$$

a végül kiadódik a keresett (20) képlet:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_l \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}^2 \mathbf{Y}_l &= 2\varepsilon \mathbf{X}_l (\mathbf{M}^2 - \mathbf{M}_z^2 + \varepsilon^2) - \varepsilon (\mathbf{X}_l \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}^2 \mathbf{X}_l) + 2\varepsilon \mathbf{X}_l \mathbf{M}_z^2 \\ &\quad - 2\varepsilon^2 (\mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_x \mathbf{M}_z - \mathbf{q}_{lx} \mathbf{M}_z \mathbf{M}_x + \mathbf{M}_y \mathbf{M}_z \mathbf{q}_{ly} - \mathbf{M}_z \mathbf{M}_y \mathbf{q}_{ly}) \\ &= 2\varepsilon \mathbf{X}_l (\mathbf{M}^2 - \mathbf{M}_z^2 + \varepsilon^2) - \varepsilon (\mathbf{X}_l \mathbf{M}^2 - \mathbf{M}^2 \mathbf{X}_l) + 2\varepsilon \mathbf{X}_l \mathbf{M}_z^2 - 2\varepsilon^3 \mathbf{X}_l \\ &= \varepsilon (\mathbf{X}_l \mathbf{M}^2 + \mathbf{M}^2 \mathbf{X}_l). \end{aligned}$$

²⁴ *S. Goudmit* és *R. de L. Kronig*, Naturwiss. 13, 90, 1925; *H. Hönl*, ZS. f. Phys. 32, 340, 1925.

²⁵ *P. Debye*, Ann. d. Phys. 33, 1427, 1910.

²⁶ *S. N. Bose*, ZS. f. Phys. 26, 178, 1924.

²⁷ *A. Einstein*, Sitzungber. D. Preuss. Akad. d. Wiss. 1925. 3. old. *Einstein* hipotézisének megítéléséhez, mely szerint az ideális gázra is a statisztika ezen alakja alkalmazandó, a mi megfontolásaink természetesen nem szolgáltathatnak új szempontot.

²⁸ Természetesen ezt a kifejezést pl. valamely kontinuum rugalmas hullámaira vonatkozóan is feltételeznünk kell, minek folytán bizonyos módosítás válik szükségessé a fény- és a hanghullámok termikus egyensúlyáról *Schrödingertől* megadott megfontoláson (Phys. ZS. 25, 89, 1924). Ezt a módosítást könnyű elvégezni a Compton-effektusra vonatkozó valószínűségi feltevés alapján, feltételezve az Einstein-féle gázelméletet, amint azt korábban a szerzők egyike publikálta (*P. Jordan*, ZS. f. Phys. 33, 649, 1925).

²⁹ *M. Wolfke*, Phys. ZS. 22, 375, 1921.

³⁰ *W. Bothe*, ZS. f. Phys. 20, 145, 1923; 23, 214, 1924.

³¹ *H. A. Lorentz*, Les Théories Statistiques en Thermodynamique (Leipzig, 1916), 59. old.

³² *P. Ehrenfest*, Előadás a Göttingai Anyagszerkezet Szemináriumon, 1925, nyara. Ennek az előadásnak a tartalma értékes segítséget nyújtott megfontolásainkban. Időközben publikálva: ZS. f. Phys. 34, 362, 1925.

KÖNYVISMERTETÉS

Robert H. Dicke and James P. Wittke: *Introduction to Quantum Mechanics*,

Addison-Wesley Publishing Company, Inc. Reading, Mass. USA 1960

Dicke és Wittke princetoni fizikusok a nemrelativisztikus kvantummechanika fizikai fogalmainak és matematikai megfogalmazásának bevezető jellegű tárgyalását adják ebben a könyvben: klasszikus mechanikai, elektromágnességtani és atomfizikai ismeretekre, továbbá a differenciál-, és integrálszámításra támaszkodva, felsőbb éves fizika szakos hallgatók számára. (Pontosabban: a szerzők — mint az előszóban írják — könyvüket az amerikai egyetemek graduate szintje első évfolyamának szánták, a könyv első felét azonban az undergraduate szint előrehaladott hallgatói számára is megfelelőnek tartják.)

Az 1—3. fejezeteket felölölő *első rész* mindenekelőtt a klasszikus mechanika alkalmazhatatlanságára mutat rá az atomi jelenségek körében (1.), majd a hullámok terjedését, a bizonytalansági összefüggést és a hullámcsomagok mozgását tárgyalja (2.), végül heurisztikus megfontolásokkal eljut a Schrödinger-egyenlethez, mely a potenciáldomb, -fal (átthaladás és visszaverődés), -völgy (speciálisan a harmonikus oszcillátor-völgy) problémáira nyer alkalmazást (3.).

A *második rész*, mely a 4—10. fejezeteket foglalja magában, a szemléletes hullámképen túllepve, a kvantummechanika formális apparátusának részletesebb kifejtésére, posztulátumokra alapozott tárgyalásra törekszik. A Fourier-sorok és -integrálok, továbbá a Dirac-delta áttekintését követően a sajátértékegyenletekre és a várható értékek tulajdonságaira vonatkozó megjegyzések következnek (4.). A klasszikus mechanika (Lagrange- és Hamilton-egyenletek, Poisson-zárójelek, kanonikus transzformációk) áttekintését (5.) követi az operátor-formalizmusnak szentelt fejezet (6.). Itt adják meg a szerzők a kvantummechanika alapposztulátumait (állapot \leftrightarrow hullámfüggvény, valamint fizikai mennyiség \leftrightarrow hermitikus operátor hozzárendelés, a sajátfüggvényrendszer teljessége, a várható érték definíciója, az időbeli változás leírása, kapcsolat a kommutátorok és a Poisson-zárójelek között), majd rámutatnak a kvantummechanika formalizmusának algebrai vonatkozásaira, melyekre példaként a harmonikus oszcillátor tárgyalása szolgál (a keltő és elnyelő, vagy — a szerzők elnevezése szerint — a „létra” operátorok segítségével); a fejezet a sokrészecske-rendszerekre vonatkozó megjegyzésekkel zárul. A mérés központi fontosságú problémája a fotonpolarizáció példáján nyer megvilágítást (7.); itt érdekes az Einstein—Podolsky—Rosen-féle „paradoxon”-nal analóg eset tárgyalása. A korrespondencia-elv c. fejezet (8.) mindenekelőtt arra mutat rá, hogy a hullámcsomagok mozgását a klasszikus határesetben a klasszikus mechanika mozgásegyenletei írják le; majd a kvantummechanikai megtalálási valószínűsűrsűrűség és a klasszikus mechanikai leírás kapcsolatáról olvashatunk (a harmonikus oszcillátor példáján); a fejezetet a korrespondencia-elv és a bizonytalansági összefüggés kapcsolatára vonatkozó megjegyzés zárja. Önálló fejezet tárgyat képezik az impulzusmomentum kvantummechanikájának alapelemei (9.). Az impulzusmomentum sajátértékeinek algebrai (a felcserélési összefüggéseken alapuló) meghatározását a pályamomentum problémájának megszokott tárgyalása követi (differenciáloperátorok, gömbfüggvények felhasználásával); az impulzusmomentum-összeadás problémaköréből két momentum eredője lehetséges értékeinek meghatározását találjuk meg itt, végül a „T osztályba tartozó” (elterjedtebb nevükön: vektor-) operátorok fontos és hasznos tulajdonságairól olvashatunk. A centrális erők c. fejezetben (10.) általános jellegű megjegyzések mellett a hidrogén atom (mint egy- és mint kétestestprobléma) és a háromdimenziós harmonikus oszcillátor tárgyalását találjuk meg; ezt követi a szabad mozgás diszkussziója gömbi koordinátákban, valamint a paritás fogalmának bevezetése.

A *harmadik részt* nyolc fejezet alkotja. Itt először is bevezetést kapunk a mátrixok segítségével történő kvantummechanikai leírásba (11.). (Korábban kizárólag hullámmechanikai módszerek kerültek felhasználásra.) Alkalmazásként az impulzusmomentum problémájának tárgyalása következik mátrix-reprezentációban (12.). A spin elmélete a precesszió és a paramágneses rezonancia példáján nyer megvilágítást. A transzformáció-elméletet tárgyaló fejezet (13.) nagymértékben él a geometriai szemléltetés lehetőségével; itt találkozunk a Hilbert-tér, az unitér transzformációk és csoporttulajdonságai, a folytonos mátrixok, a (Hilbert-térbeli operátorokra alkalmazott) kanonikus transzformációk fogalmával. Ez után három, a közelítő módszereknek szentelt fejezet következik. A közelítő módszerekre vonatkozó általános megjegyzéseket, az időtől független és az időtől függő perturbációelmélet, a variációs módszerek és a WKB közelítés ismertetését (14.) az elektromágneses kölcsönhatások tárgyalása követi a megszokott közelítésben (15.), majd a szórás-

folymatokra alkalmazható módszerek (Born-közelítés, parciális hullámok módszere) kerülnek ismertetésre (16.). Az azonos részecskék c. fejezet (17.) a Pauli-elv, a spinfüggvények szimmetriája, a hidrogénkötés, a para- és az ortohidrogén diszkusszióját öleli fel. A könyvet záró fejezet (18.) a kvantumstatisztika elemeit ismerteti (sűrűségmátrix, mikrokanonikus, kanonikus és nagykanonikus sokaság, Boltzmann-, Bose- és Fermi-statisztika).

Kiemelésre érdemes, pozitív vonása a könyvnek néhány olyan problémakör feldolgozása, amelyeket az ilyen szintű könyvek rendszerint elhanyagolnak. Megemlítjük ezek közül a paramágneses rezonanciát, a kvantumstatisztika egyes kérdéseit, a vektoroperátorokat. Mindazonáltal a feldolgozott anyag tekintetében a szerzők legnagyobbbrészt bevált hagyományokat követve kitaposott úton haladnak.

Mint az az előszóban olvasható, a szerzők egyik fő célja az volt, hogy a hangsúlyt az algebrai módszerekre helyezték és megmutassák azok eleganciáját és nagy teljesítőképességét. Ez a szempont valóban indokolhatja egy új bevezető kvantummechanika-könyv megírását, még a kvantummechanika jelenleg rendelkezésre álló bőséges irodalma mellett is. A kitűzött cél megvalósítása azonban — úgy véljük — nem sikerült maradéktalanul. Az algebrai módszerek alkalmazása *ad hoc* jellegű; nem esik említés olyan alapvető tényekről, amilyenek pl. a hullámfüggvény forgást-transzformációja, az impulzuszómomentum kapcsolata az elforgatásokkal. Így azután a „T osztályba tartozó” operátorok definícióját indokolás nélkül kapja az olvasó, s említés nélkül maradnak olyan egyszerű geometriai tények, amelyek a kvantummechanikában alkalmazásra kerülő képletek könnyű megértéséhez, szemléletes értelmezéséhez nélkülözhetetlenek. A magunk részéről — összhangban a hazai felsőoktatás gyakorlatával — szívesebben látnánk a kvantummechanika algebrai módszereinek szisztematikusabb, szabatosabb s ugyanakkor szemléletes tárgyalását az adott szinten.

A könyvben tárgyalt sokféle alkalmazás megvilágítását elősegíti a nagyszámú értékes gyakorló példa. A nagy műgonddal készült ábrák elismerést érdemelnek. A könyv nűszaki kivitelezése az amerikai tankönyveknél megszokott magas színvonalon áll.

Györgyi Géza

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1965. X. 16. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 7,75 (A/5) ív, 4 ábra

Szegedi Nyomda Vállalat 65-5848

MAJTH
TUDOMÁNYOS AKADEMIA
KÖNYVTÁRA

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.591

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Pócsik György: A kvantum térelmélet alapelvei és legújabb eredményei III.</i>	1
<i>Kovács István és Chatel Péter: Diszlokációk kontinuum elmélete III.</i>	15

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan: A kvantummechanikáról II</i>	35
--------------------------------------------------------------------------	----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Robert H. Dicke and James P. Wittke: (Györgyi Géza)</i>	87
------------------------------------------------------------------	----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIV. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KRISTÁLYOK DINAMIKÁJÁNAK VIZSGÁLATA LASSÚ NEUTRONOK SZÓRÁSÁVAL

SOLT GYÖRGY

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

- I. A kristálydinamika elemi gerjesztései: a fononok
 1. A rácsdinamika Hamilton függvénye
 2. A dinamikai tenzor szimmetriái
 3. A hullámszámvektorok és a sajátértékprobléma
 4. A rácsrezgések kvantumai, a fononok
 5. Fononok kísérleti vizsgálata és az elmélet ellenőrzésének lehetőségei
- II. Lassú neutronok szórása kristályon
 1. A koherens és inkoherens hatáskeresztmetszet
 2. A fonon-sor
 3. Koherens szórás. Diffrakció és diszperziós összefüggések
 4. Inkoherens szórás, a fononspektrum
 5. Néhány további probléma

Bevezetés

A kristályok fizikai tulajdonságainak magyarázatára Born és Kármán által 1912 körül kidolgozott elmélet a kvantummechanika nyelvére lefordítva igen eredményesnek bizonyult.

Ez az elmélet a kristályt lényegében periodikus szerkezetű óriásmolekulának tekinti, melynek ionokból felépülő rácsa egyensúlyi helyzete körül kis amplitúdójú rezgéseket végez. Ennek a mozgásnak jellegzetes tulajdonsága, hogy kollektív: a kristályt összetartó kémiai kötőerők miatt az egyes ionok mozgása szigorúan össze van hangolva. Ha viszont nem az egyes ionok koordinátáit, hanem a fellépő kollektív rezgések amplitúdóit tekintjük, azt látjuk, hogy ezek már éppúgy „majdnem” egymástól függetlenül változnak, mint egy szabad gáz részecskéinek esetében. Ezeknek a rezgési módusoknak a fizikai adatait, energiáját, polarizációját stb. természetesen a kémiai kötés egyértelműen megszabja. A mérés számára hozzáférhető fizikai mennyiségek (fajhő, optikai tulajdonságok) egy kis számú, a kötőerőket jellemző állandó paraméter függvényeként viszonylag egyszerűen előállíthatók.

Egészen a legutóbbi időkig azonban az elmélet közvetlen ellenőrzése nem volt lehetséges. A kapott kísérleti tapasztalatokat ugyan sikerült értelmezni, de egész sor, az elmélet által előre jelzett kapcsolat ellenőrzése, a paraméterek közvetlen meghatározása mérések útján még hátra volt. Ennek oka abban rejlett, hogy hiányzott az a „próbatest”, amely kristály különböző rezgéseit felbontva tudta volna észlelni, mellyel a létrejövő kollektív mozgások részleteit nyomon tudtuk volna követni.

Új helyzet állott elő a termikus reaktorok megjelenésekor. A létrejövő termikus (~ 25 millielektronvolt energiájú) neutronok nyalábját a kristályra bocsátva nemcsak a periodikus szerkezetről kapunk képet — mint pl. a szokásos röntgen-

* Érkezett 1965. jún. 17.

diffrakciónál — hanem a kristályba épült atomok mozgásának mikrodinamikai, részletes feltérképezése is lehetségessé válik.

Noha részint a hagyományos vizsgálati módszerek további fejlődése, részint új mérési lehetőségek (pl. Mössbauer-effektus) megjelenése miatt a neutronok korántsem kizárólagos eszközei a kristály-dinamikai kutatásoknak, a neutronok szórásának módszere „direkt” jellege, következőképpen elméleti egyszerűsége miatt elsődleges jelentőségű ezen a téren.

Az első részben a kristályfizika néhány alapvető fogalmát és összefüggését ismertetjük, olyan részletességgel, ahogyan a későbbiek megkívánják. Ennek a fejezetnek a megírásában elsősorban *Leibfried* [1] és *Born* és *Huang* [2] munkáit használtuk fel, a további hivatkozásokra utalunk.

A neutron-foton kölcsönhatással foglalkozó második részben elsősorban *Sjölander* [22] és *Kagan* [26] összefoglaló cikkeire támaszkodtunk.

I. A kristálydinamika elemi gerjesztései: a fononok

1. A rácsdinamika Hamilton függvénye

Ebben a fejezetben az ideális (hibátlan) kristály mozgását vizsgáljuk, lényegében a *Born* és mások [2] által továbbfejlesztett Born—Kármán-modell alapján.

Ez az elmélet abból indul ki, hogy ideális kristály esetén nem túl magas hőmérsékleten helyes a következő két alapfeltevés:

1. A kristályt felépítő atomok magjai rendezetten, egy „enyhén deformált” rács pontjaiban helyezkednek el. Ezen azt értjük, hogy a magok egyensúlyi helyzetei szabályos geometriai rácsot alkotnak, és a mozgás során az atomok kevéssé mozdulnak ki egyensúlyi helyzetükből. Az említett egyensúlyi rács a néhány, esetleg egyetlen atomot tartalmazó ún. *elemi cella* meghatározott $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ vektorokkal való eltolásával létrejövő periodikus szerkezet; feltételezzük, hogy az eltolást mindhárom irányban N -szer hajtottuk végre és N igen nagy szám. Az elemi cellában levő atomok számát p -vel jelöljük. Ha $p=1$, a cellában egyetlen atom van, ez a *Bravais-rács*. Az egyes magok helyvektora tehát így írható:

$$\mathbf{R}_k^l(t) = \mathbf{l} + \mathbf{r}_k + \mathbf{u}_k^l(t), \quad (1.1)$$

ahol \mathbf{l} a cella helyzetét jellemzi, pl. a cella csúcsának helyvektora,

$$\mathbf{l} = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (l_i \text{ egész})$$

\mathbf{r}_k a k -dik mag egyensúlyi helyét jelöli ki a cellán belül,

$$k = 1, 2, \dots, p$$

$\mathbf{u}_k^l(t)$ az egyensúlyi helyzettől való eltérés a t időpontban. Bravais kristálynál a k index felesleges, egyszerűen

$$\mathbf{R}^l(t) = \mathbf{l} + \mathbf{u}^l(t).$$

2. A kristályt felépítő atommagok és elektronok első pillantásra rendkívül bonyolult mozgásának leírására sikeresen használható az ún. *adiabatikus közelítés*.

Ennek lényege, hogy a magok és elektronok mozgását bizonyos értelemben „külön” tárgyalhatjuk. Ezt úgy érjük el, hogy feltételezzük: az elektronok mozgását a magok „sebessége” nem befolyásolja, az elektron-hullámfüggvényt a magok

mindenkori helyzete, mint potenciál szabja meg. Így kiszámítva az elektron-alapállapot energiáját, az függni fog a pillanatnyi mag-koordinátáktól, és ez az elektron-alapállapot energia szolgál viszont a magok mozgásának potenciáljául. A feltevés igen szemléletes: a magok mozgása olyan lassú az elektronok mozgásához képest, hogy az elektronoknak „van idejük” felvenni a mindenkori mag-elrendeződésnek megfelelő alapállapotot; a magok pedig ehhez képest igen lassan, úgy igyekeznek elrendeződni, hogy ez az elektron-alapállapot energia minimális legyen.

Matematikai szempontból a kétféle részecske tömegarányának kicsinysége, és mozgási frekvenciáik arányának nagy értéke indokolja a közelítést. Az utóbbi feltétel különösen fémekben nem mindig teljesül, és így a közelítésnél való eltérés, a kis korrekciónak tekintett *elektron-fonon kölcsönhatás* sokszor igen jelentőssé válik.

A továbbiakban kizárólag a magok mozgásával foglalkozunk.

A fenti két feltevés alapján a magok dinamikáját a következő Hamilton-függvény szabályozza:

$$H = \sum_{l,k} \frac{1}{2M_k} (\mathbf{p}_k^l)^2 + V_{\text{eff}}(\dots \mathbf{u}_k^l \dots), \quad (1.2)$$

ahol \mathbf{p}_k^l az \mathbf{u}_k^l kitéréshez konjugált impulzus, és M_k a k -adik mag tömege*, V_{eff} pedig az effektív potenciál, mely az adiabatikus közelítésből adódik. Fejtsük sorba a potenciális energiát az egyensúlyi helyzet körül a kitérések hatványai szerint:

$$H = \sum_{l,k} \frac{1}{2M_k} (\mathbf{p}_k^l)^2 + V_{\text{eff}}(u_k^l = 0) + \frac{1}{2} \sum_{l,k} \sum_{l',k'} g(k, \mathbf{l}, \eta; k', \mathbf{l}', \eta') u_{k\eta}^l u_{k'\eta'}^{l'} + \dots,$$

ahol elhagytuk az első deriváltakat, mivel az $u=0$ helyen eltűnnek a minimum feltételezése miatt, a γ, γ' index a vektorok komponenseit jelöli, továbbá a

$$\left. \frac{\partial^2 V}{\partial u_{k,\gamma}^l \partial u_{k',\gamma'}^{l'}} \right|_{u_k^l=0} = g(k, \mathbf{l}, \gamma; k', \mathbf{l}', \gamma') \quad (1.3)$$

jelölést alkalmaztuk.

Az energiát mérhetjük az egyensúlyi helyzet energiájától, ekkor a konstans elmarad, és ha bevezetjük a

$$\tilde{u}_k^l = \sqrt{M_k} u_k^l; \quad \tilde{\mathbf{p}}_k^l = \frac{1}{\sqrt{M_k}} \mathbf{p}_k^l \quad (1.4)$$

jelöléseket, az energia így írható:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{l,k} (\tilde{\mathbf{p}}_k^l)^2 + \frac{1}{2} \sum_{l,k} \sum_{l',k'} \tilde{u}_k^l \mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}') \tilde{u}_{k'}^{l'} + \dots, \quad (1.5)$$

ahol a $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ tenzor komponenseit a

$$\mathbf{G}_{kk'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')_{\gamma, \gamma'} = (\sqrt{M_k M_{k'}})^{-1} g(k, \mathbf{l}, \gamma; k', \mathbf{l}', \gamma')$$

összefüggés definiálja.

Célszerű lesz néhány egyszerűbb jelölés bevezetése. Rögzítsük először az \mathbf{l}, \mathbf{l}' indexeket. Bravais kristály esetén, mint mondtuk, a k index fel sem lép, a szereplő mennyiségek az $\tilde{\mathbf{u}}^l$ 3 komponensű vektorok és a $\mathbf{G}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ közönséges tenzorok.

* Indexként használva a vektorokat nem vastagítjuk.

Az általános esetben definiáljuk az $\tilde{\mathbf{u}}^l$ $3 \times p$ dimenziós vektort így:

$$\tilde{\mathbf{u}}^l = (\tilde{u}_1^l, \dots, \tilde{u}_p^l) \quad (1.6a)$$

Láthatóan $p=1$ esetén $\tilde{\mathbf{u}}^l$ értelme nem változott, míg összetett rács esetében $\tilde{\mathbf{u}}^l$ a cellában levő összes mag koordinátáit összefoglalja. Ugyanígy foglalhatjuk össze az l -edik cellához tartozó impulzusokat:

$$\tilde{\mathbf{p}}^l = (\tilde{p}_1^l, \dots, \tilde{p}_p^l) \quad (1.6b)$$

Hasonló módon egymás mellé és alá írva a különböző kk' indexű $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ tenzorokat $3p \times 3p$ dimenziós tenzorhoz jutunk, melynek i, i' komponensei:

$$\mathbf{G}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')_{i,i'} = G_{k,k'}(l, l')\gamma, \gamma' \quad (i, i' = 1 \dots 3p) \quad (1.6c)$$

Természetesen Bravais-rácsnál itt is az eredeti definíciót kapjuk vissza.

Foglaljuk most össze az összes $\tilde{\mathbf{u}}_l$ vektort egyetlen jelöléssel:

$$\mathbf{u} = (\tilde{\mathbf{u}}^{l_1}, \dots, \tilde{\mathbf{u}}^{l_{\max}}) \quad (1.7a)$$

és rendezzük az \mathbf{l} és \mathbf{l}' index szerint ugyanúgy sorba, illetőleg oszlopba a $\mathbf{G}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ tenzorokat. Az így nyert $3N^3p \times 3N^3p$ dimenziós tenzort *dinamikai tenzornak* hívjuk, komponenseire tehát:

$$G_{l,k,\gamma;l',k',\gamma'} = G_{\alpha,\beta} = G_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')\gamma, \gamma' \quad (1.7b)$$

Ezeket a komponenseket a továbbiakban egyszerűen erőállandóknak nevezzük. Hasonlóan eljárva a $\tilde{\mathbf{p}}^l$ változók esetén, a dinamikai tenzorral (1.5) így írható fel:

$$H = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{p}} \cdot \tilde{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \mathbf{u} \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{u} + \dots \quad (1.8)$$

A *harmonikus közelítés* abban áll, hogy a pontozással jelölt tagokat elhagyjuk, a sorfejtésben tehát megállunk a másodrendű tagoknál. Részletesebben csak ezt az esetet vizsgáljuk, az elhagyott ún. anharmonikus tagok szerepére később röviden kitérünk.

A harmonikus közelítésben ezek szerint a magok rendszerének mozgására vonatkozó összes információ a dinamikai tenzor elemeiben, a $G_{\alpha\beta}$ számokban van összesűrítve. Érdemes lesz ezért először is a G mátrix tulajdonságaival megismerkedni.

2. A dinamikai tenzor szimmetriái

A \mathbf{G} tenzor elemei között egész sor összefüggés áll fenn, melyek a dinamikai tenzor szimmetria-tulajdonságaiból következnek. Vegyük sorra most ezeket a tulajdonságokat. Mindenekelőtt a parciális deriválás sorrendjének felcserélhetősége miatt:

$$G_{l,k,\gamma;l',k',\gamma'} = G_{l',k',\gamma';l,k,\gamma} \quad (1.9)$$

tehát a \mathbf{G} tenzor *szimmetrikus*.

Mínhogy továbbá a $\mathbf{u}_k^l = 0$ helyen a potenciális energia minimális, ezért \mathbf{u}_k^l tetszőleges értékeire (tehát $\tilde{\mathbf{u}}_k^l$ tetszőleges értékeire) (1.5) második tagja pozitív. Ez (1.8) alapján azt jelenti, hogy

$$\tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{u} > 0 \quad \text{ha} \quad \mathbf{u} \neq 0, \quad (1.10)$$

tehát \mathbf{G} pozitív definit kvadratikus alak mátrixa.* Az ismert tétel szerint ezért *sajátértékei pozitív számok*.

Újabb összefüggésre jutunk, ha az (1.5) Hamilton-függvény alapján felírjuk a mozgásegyenleteket:

$$\frac{d^2}{dt^2}(\tilde{u}_{k,\gamma}^l) = - \sum G_{l,k,\gamma;l',k',\gamma'} u_{k',\gamma'}^l, \quad (1.11)$$

tehát

$$M_k \ddot{u}_{k,\gamma}^l = - \sum \sqrt{M_k M_{k'}} G_{l,k,\gamma;l',k',\gamma'} u_{k',\gamma'}^l.$$

Világos viszont, hogy ha u_k^l helyére egy k és l -től független c vektort írunk, ez azt jelenti, hogy az egész kristály c -vel eltolódik. Ilyenkor persze nem ébrednek erők, melyek a (k, l) -dik magot gyorsítanák, hiszen a magok relatív helyzete változatlan maradt. Ezért *bármely* c vektorra

$$\sum_{k'l'\gamma'} \sqrt{M_k M_{k'}} G_{l,k,\gamma;l',k',\gamma'} C_{\gamma'} = 0,$$

tehát következik, hogy

$$\sum_{k',l'} \sqrt{M_k M_{k'}} G_{l,k,\gamma;l',k',\gamma'} = 0 \quad (k, l, \gamma, \gamma' \text{ tetsz.}). \quad (1.12)$$

Hasonló jellegű összefüggés nyerhető, ha minden mag kitérésének helyébe olyan vektort írunk, mely annak felel meg, hogy a kristályt, mint egészet, valamely pontja körül merev testként elforgattuk. (Mind ezekre, mind pedig további, az erőállandók tulajdonságaira vonatkozó ilyen „összeg-típusú” összefüggésekre nézve ld. pl. [2]-t.

Gondoljuk most meg, hogy az eddig említett szimmetria-tulajdonságok egészen általános érvényűek. Az erőállandókra vonatkozó fenti összefüggések tetszőleges pontrendszer nem is feltétlenül harmonikus mozgásai esetén is érvényesek. Az a tény viszont, hogy a kristály egyensúlyi rácsa az elemi cella egyszerű ismétlődése, a dinamikai tenzor rendkívül nagyfokú egyszerűsödését vonja maga után. A $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ tenzorok ugyanis definíciójuk alapján az egyensúlyi helyzetre jellemző mennyiségek. Mivel az egyensúlyi helyzet szigorúan periodikus, a viszonyok bármely l rácsvektorral arrább ugyanolyanok, mint a kiindulási helyen, ezért a $(k_1 \mathbf{l}_1)$ és (k_2, \mathbf{l}_2) illetve a $(k_1, \mathbf{l}_1 + \mathbf{l})$ és $(k_2, \mathbf{l}_2 + \mathbf{l})$ helyen levő magok kitéréseit a potenciális energia kifejezésében összekapcsoló tenzorok számértéke is azonos kell legyen:

$$\mathbf{G}_{k_1, k_2}(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2) = \mathbf{G}_{k_1, k_2}(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}, \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}).$$

Más szóval a $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ tenzorok csak vektor-változóik különbségétől függnek:

$$\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}') = \mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l} - \mathbf{l}'). \quad (1.13a)$$

Ez az összefüggés a kristály legjellemzőbb szimmetriatulajdonságát, a rácsvektorral való eltolással szemben mutatott invarianciát fejezi ki. Másfelől azonban az állítás ebben a formájában nem egészen helyes. Világos ugyanis, hogy (1.13a) csak a kristály belsejében teljesül, mivel a kristály szélén levő magok helyzete egészen más, mint azoké, melyeket minden oldalról rács vesz körül, a széleken az eltolási szimmetria megszűnik. Tény azonban, hogy a kristály igen sok tulajdonságát a túlnyomóan nagy „belső” tartomány szabja meg, ezek vizsgálatakor a széleken levő atomok szerepét egyáltalán nem kell tekintetbe venni. Egyik lehetőségünk tehát az, hogy

* Ez az állítás nem egészen pontos. A kristály merev-test-szerű eltolása vagy forgatása esetén $\mathbf{u} \cdot \mathbf{G} \mathbf{u} = 0$. A dinamikai tenzor 6 sajátértéke ezért 0. Erre vissza fogunk térni.

a kristályt végtelen nagynak gondoljuk, és ezzel a szélek hatását elhanyagoljuk. Ez azonban azzal a hátránnyal jár, hogy a kristály szabadsági fokainak száma végtelen nagyra válik, és ez a később következő mechanikai számításokat feleslegesen elbonyolítaná.

Ezért inkább a következőképpen szabadulunk meg a szélek komplikáló hatásától: Teljessé tesszük a kristályban uralkodó periodicitást úgy, hogy módosítjuk a szélső atomokra vonatkozó $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ tenzorok értékét a következőképpen: az erőállandó-tenzorok viselkedjenek úgy, mintha a kristály „vége” után ismét az eleje következne, tehát

1. mindenütt teljesüljön az (1.13a) összefüggés,

$$2. \text{ ezen felül } \mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{N}\mathbf{a}_i - \mathbf{l}) = \mathbf{G}_{k,k'}(-\mathbf{l}) \quad (1.13b)$$

Ennek az eljárásnak igazolására a következőket mondhatjuk: Fel szokás tételni, hogy a rácsban a kölcsönhatás távolsága a rács méreteihez képest rövid, a néhány rácsállandónyi távolságon túli atomok között kapcsolatot teremtő $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ tenzor 0.*

Ekkor viszont könnyű belátni, hogy a fenti feltételek teljesítéséhez a \mathbf{G} tenzor *csak viszonylag jelentéktelen számú elemét kell megváltoztatni*, melyek a felület közelében elhelyezkedő magokkal kapcsolatosak. Egzaktnak bizonyítható [2], hogy a \mathbf{G} tenzor „szélső” elemeinek ez a megváltoztatása a következő eredmények helyességén nem változtat, viszont a tárgyalás így igen egyszerűvé válik. A szélső atomok erőállandóinak ez a módosítása jelenti az ún. *periodikus határfeltétel* teljesítését. Ezek a határfeltételek lehetővé teszik, hogy a rácsban uralkodó eltolási szimmetriát az egyszerű (1.13) képletekkel pontos matematikai formában megfogalmazzuk. Anélkül, hogy a periodikus határfeltételeket „megvalósítva” képzelnénk (mint például két végén összekötött lineáris lánc esetén tehetjük), elégedjünk meg annyival, hogy így sikerül megszüntetni a széleken levő atomok különleges helyzetét, „belsővé” téve őket dinamikai szempontból, sikerül megőrizni a szabadsági fokok véges számát, és makroszkopikus méretű kristály esetén az elkövetett hiba jelentéktelen.

Az erőállandók (1.13) feltételekkel kifejezett diszkrét translációkra vonatkozó szimmetriája minden kristály közös tulajdonsága.

Ezen felül azonban a természetben előforduló kristályok gyakran olyanok, hogy rácsvektorokkal való eltoláson kívül léteznek olyan R transzformációk (tükrözés, forgatások) melyek az egyensúlyi rácsot önmagába viszik át.

Vizsgáljuk meg, mit jelent ez, az egyszerűség kedvéért Bravais-rács esetén, a dinamikai tenzor szempontjából.

Alkalmazzuk az R transzformációt a fizikai, deformált kristályra. Ekkor új kristályt kapunk, melynek potenciális energiája a forgatástól vagy tükrözéstől persze nem változott:

$$V_R = V = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i'} \tilde{\mathbf{u}}'_i \mathbf{G}(\mathbf{l}-\mathbf{l}') \tilde{\mathbf{u}}_{i'} = \frac{M}{2} \sum_i \sum_{i'} \mathbf{u}'_i \mathbf{G}(\mathbf{l}-\mathbf{l}') \mathbf{u}'_{i'}.$$

Mivel azonban az új kristály egyensúlyi rácsa a régiével azonos (hiszen R a geometriai rács szimmetria-transzformációja), csupán a régi rács \mathbf{l} vektorra az \mathbf{m} , \mathbf{l}' vektorra az \mathbf{n} vektorba ment át:

$$\mathbf{m} = R\mathbf{l}; \quad \mathbf{n} = R\mathbf{l}',$$

*Ionkristályoknál a Coulomb-kölcsönhatást speciális módszerekkel külön kell tárgyalni [2].

ahol \mathbf{R} a vektorokat forgató (vagy tükröző) mátrix, azért az is igaz, hogy a dinamikai tenzor elemei ugyanazok a $\mathbf{G}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ tenzorok, mint előbb. A potenciális energia tehát:

$$V_R = \frac{M}{2} \sum_m \sum_n \mathbf{v}^m \mathbf{G}(\mathbf{m}-\mathbf{n}) \mathbf{v}^n,$$

ahol \mathbf{v}^m az új rács kitérésvektora az \mathbf{m} helyen, a mi esetünkben

$$\mathbf{v}^m = \mathbf{R}\mathbf{u}^l; \quad \mathbf{v}^n = \mathbf{R}\mathbf{u}^{l'}.$$

A két kifejezés egyenlőségéből minden egyes l és l' esetére

$$(\mathbf{R}\mathbf{u}^l) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{m}-\mathbf{n}) \cdot \mathbf{R}\mathbf{u}^{l'} = u_l \mathbf{G}(\mathbf{l}-\mathbf{l}') u^{l'},$$

tehát $\tilde{\mathbf{R}}$ -gal jelölve \mathbf{R} transzponáltját, a

$$(\mathbf{R}\mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot (\tilde{\mathbf{R}}\mathbf{b})$$

azonosság alapján a dinamikai tenzor teljesíti a

$$\tilde{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{R}\mathbf{l} - \mathbf{R}\mathbf{l}') \mathbf{R} = \mathbf{G}(\mathbf{l} - \mathbf{l}') \quad (1.14)$$

egyenletet minden $\mathbf{l} - \mathbf{l}'$ érték mellett.

Ennek a képletnek levezetésénél természetesen felhasználtuk, hogy a rács Bravais-típusú, tehát $\mathbf{G}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ közönséges 3×3 dimenziós tenzor. Világos azonban, hogy az eredmény összetett rács esetére is általánosítható, és hasonló jellegű összefüggések nyerhetők a köbös, tetragonális stb. szimmetriákat mutató összetett rácsok $\mathbf{G}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ tenzorának „elemeire”, a $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ tenzorokra is. Azt látjuk tehát, hogy minden újabb szimmetria létezése (1.14) alakú egyenletet jelent, tehát csökkenti a \mathbf{G} tenzor független elemei számát.

Valamennyi, fenti szimmetriatulajdonságot fel fogjuk használni a következő fejezetben, a dinamikai tenzor sajátértékproblémájának megoldásánál.

3. A hullámszámvektorok és a sajátértékprobléma

Ebben a részben olyan mennyiségekről és összefüggésekről lesz szó, amelyeket a tárgyalás folytonossága érdekében célszerű külön pontban összegyűjteni. Kezdjük néhány egyszerű definícióval.

A reciprok-rács a

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3} \quad (1.15)$$

vektorok egész számokkal képezett lineáris kombinációiból épül fel, rácspontjainak helyvektorai tehát:

$$\mathbf{g} = g_1 \mathbf{b}_1 + g_2 \mathbf{b}_2 + g_3 \mathbf{b}_3 \quad g_i \text{ egész} \quad (1.16)$$

A szokásos megállapodás szerint a reciprok-rács origójának valamely rácspontot választják. A definíciók alapján látható, hogy egy rácsvektor és egy reciprok-rács vektor skaláris szorzatára:

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{l} = 2\pi (g_1 l_1 + g_2 l_2 + g_3 l_3) = 2\pi \cdot \text{egész} \quad (1.17)$$

tehát \mathbf{G} pozitív definit kvadratikus alak mátrixa.** Az ismert tétel szerint ezért *sajátértékei pozitív számok.*

Megjegyzendő, hogy a kristály helyzetét akár a reciprokrács, akár a valódi rács térbeli helyzete egyformán meghatározza.

Az adott kristályhoz tartozó *hullámszámvektorok*

$$\mathbf{q} = q_1 \mathbf{b}_1 + q_2 \mathbf{b}_2 + q_3 \mathbf{b}_3 \quad q_i = 0, \pm \frac{1}{N}, \dots, \pm \frac{m_i}{N}, \dots \quad (m_i \text{ egész}) \quad (1.18)$$

alakúak, q -val csak ilyen vektort fogunk jelölni.

A *Brillouin-zóna** a reciprokrácsnak az a térfogateleme, melynek pontjai közelebb vannak az origóhoz, mint bármely más reciprokrács ponthoz. Be lehet látni, hogy a Brillouin-zónát az esetleges R szimmetria-transzformációk önmagába viszik át, más szóval a rács összes szimmetriáit mutatja. A fenti definíciók alapján a hullámhosszvektorok „redukálhatók”: tetszőleges \mathbf{q} -ból reciprokrács vektor hozzáadásával egyértelműen a Brillouin-zónába eső \mathbf{q} képezhető. A hullámszámvektorok, mint látjuk, a Brillouin-zónát egyenletesen töltik ki, éspedig (1.18) alapján tetszőlegesen sűrűn. Ezt a sűrűséget úgy számíthatjuk ki, hogy a \mathbf{q} vektorok számát, N^3 -t elosztjuk a Brillouin-zóna térfogatával. A Brillouin-zóna térfogata viszont geometriai okokból egyenlő a reciprokrács elemi cellájának térfogatával, tehát a keresett sűrűség:

$$\varrho(\mathbf{q}) = \frac{N^3}{(\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{b}_3} = \frac{N^3 \cdot v_0}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^2},$$

ahol csak az (1.15) definíciót használtuk fel, és az elemi cella térfogatát v_0 -val, az egész kristályt V -vel jelöltük. Így a $d\mathbf{q}$ térfogatba eső hullámszámvektorok számát a

$$\varrho(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \frac{N^3 v_0}{(2\pi)^3} d\mathbf{q} \quad (1.19)$$

képlet szolgáltatja.

Megemlítjük még a hullámszámvektorok további fontos tulajdonságát, a definícióból azonnal belátható alábbi két azonosságot:

$$\frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}} = \delta_{\mathbf{q},0} \quad (1.20a)$$

$$\frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}} = \delta_{\mathbf{l},0}, \quad (1.20b)$$

ahol az összegezés, mint ezután mindig, \mathbf{l} esetén az összes rácspontra, \mathbf{q} esetén a Brillouin-zónabeli hullámvektorokra terjed ki.

Ezután a később fontos szerephez jutó

$$\mathbf{D}_{k,k'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{l}'} \mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l} - \mathbf{l}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \quad (1.21a)$$

tenzorok tulajdonságaival foglalkozunk. Az (1.13) és (1.18) egyenletek alapján először is

$$\mathbf{D}_{k,k'}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}}, \quad (1.21b)$$

* vagy pontosabban első Brillouin-zóna. Itt az egyszerűbb kifejezést fogjuk használni.

mivel az N^3 db különböző \mathbf{l}' mellett az \mathbf{l} szerinti összegezés ugyanazt adja. Másfelől (1.17) miatt elég a Brillouin-zónabeli \mathbf{q} -kra szorítkozni, mivel

$$\mathbf{D}_{k,k'}(\mathbf{q} + \mathbf{g}) = \mathbf{D}_{k,k'}(\mathbf{q}) \quad (1.22)$$

Jelöljük ezután $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ -val az (1.6c)-ben definiált $\mathbf{G}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ transzformációjával adódó $3p \times 3p$ dimenziós mátrixot:

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{G}(\mathbf{l}) \cdot e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}}, \quad (1.23)$$

tehát

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}) = \begin{cases} \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & \cdot \\ D_{yx} & D_{yy} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} & \text{Bravais-rácsnál} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{11} & \dots & \mathbf{D}_{1,p} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{D}_{p1} & \dots & \end{pmatrix} & p\text{-atomos rácsnál.} \end{cases}$$

Ehhez a tenzorhoz a következő pontban úgy jutunk el, hogy új változók bevezetésével négyzetek összegévé igyekszünk átalakítani a potenciális energia kifejezését. Ki fog derülni, hogy sikerül feladatunkat a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrixok sajátértékproblémájának megoldására redukálni. Éppen ezért ismerkedjünk meg előre ezzel a feladattal.

Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy mint azt látni fogjuk, a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrixok sajátértékei egyben a \mathbf{G} dinamikai tenzor sajátértékei is, ezért pozitívok. Így a megoldandó sajátérték-egyenlet ilyen alakú:

$$\mathbf{D}(\mathbf{q})\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) = \omega(\alpha, \mathbf{q})^2 \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) \quad (\alpha = 1, \dots, 3p) \quad (1.24)$$

Az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ mennyiség frekvencia-dimenziójú, az α index az adott \mathbf{q} -hoz tartozó sajátértékeket különbözteti meg. Bocsássuk most előre, hogy fizikai jelentését tekintve $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ a kristályban terjedő hullám frekvenciája. \mathbf{q} pedig a hullámszámvektora, míg az $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ vektorok azt mutatják meg, milyen irányban térnek ki az egyes atomok, az (α, \mathbf{q}) hullám terjedésekor, ezért polarizációs vektornak hívják őket.

Ilyen okokból az adott \mathbf{q} esetén a $3p$ db frekvenciát megadó

$$\omega = \omega(\alpha, \mathbf{q})$$

összefüggés neve: *diszperziós összefüggés*.

Minden \mathbf{q} -hoz általában $3p$ különböző sajátfrekvencia van. \mathbf{q} folytonos változtatásával rögzített α esetén $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ folytonosan változik, és így minden α -hoz egy $\omega_\alpha(\mathbf{q})$ folytonos függvény tartozik, melyet az $\omega(\mathbf{q})$ többértékű függvény α polarizációjú ágának hívunk.

Könnyű belátni, hogy $\mathbf{q} = 0$ esetén 3 db sajátfrekvencia 0 lesz. Válasszuk a példa kedvéért a $p=2$ esetet. A $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrix a $\mathbf{q} = 0$ helyen a definíció szerint a következő alakú:

$$\mathbf{D}(0) = \begin{pmatrix} \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{G}_{1,1}(\mathbf{l}) & \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{G}_{1,2}(\mathbf{l}) \\ \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{G}_{2,1}(\mathbf{l}) & \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{G}_{2,2}(\mathbf{l}) \end{pmatrix}.$$

Alkalmazzuk most ezt a $(\sqrt{M_1}\mathbf{c}, \sqrt{M_2}\mathbf{c})$ hatkomponensű vektorra, és nézzük például, mi az új \mathbf{c}' vektor első komponense:

$$c'_1 = \sum_{l,\gamma} [\sqrt{M_1}G_{11}(\mathbf{l})_{1,\gamma} + \sqrt{M_2}G_{1,2}(\mathbf{l})_{1,\gamma}]c_\gamma.$$

Ez a kifejezés azonban — az erőállandók (1.12) tulajdonsága miatt — nyilvánvalóan 0. Ugyanez látható be a többi komponensre is. Eredményünk tehát az, hogy a *tetszőleges* \mathbf{c} vektor esetén a $(\sqrt{M_1}\mathbf{c}, \sqrt{M_2}\mathbf{c})$ alakú vektor sajátvektora a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrixnak, 0 sajátértékkel. Mivel az ilyen alakú vektorok között a lineárisan függetlenek száma éppen 3, levonhatjuk a következtetést: $\mathbf{q}=0$ -nál az ω sajátérték háromszorosan elfajult:

$$\mathbf{f}(\alpha, 0) = \text{konst}(\sqrt{M_1}\mathbf{c}, \sqrt{M_2}\mathbf{c}) \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad \mathbf{c} \text{ tetszőleges} \quad (1.25)$$

$$\omega(1, 0) = \omega(2, 0) = \omega(3, 0) = 0.$$

Később említendő okokból a $\mathbf{q}=0$ -nál 0-vá váló ágat *akusztikus*, a többi $3(p-1)$ frekvencia-ágot *optikai ágnak* hívják.

A frekvenciák és sajátvektorok részletesebb vizsgálatához fogva először is rögzítsük a polarizációs vektorok abszolút értékét a

$$\sum_{i=1}^{3p} f(\alpha, \mathbf{q})_i^* f(\beta, \mathbf{q})_i = \delta_{\alpha, \beta} \quad (\alpha, \beta = 1 \dots 3p) \quad (1.26a)$$

normálási feltétellel, mely egyszerűen átírható a

$$\sum_{\alpha=1}^{3p} f(\alpha, \mathbf{q})_i^* f(\alpha, \mathbf{q})_j = \delta_{i,j} \quad (i, j = 1 \dots 3p) \quad (1.26b)$$

alakba is. Mindenekelőtt látszik, hogy mivel minden $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ -ból származtatott mennyiség (1.22) miatt periodikus a reciprok-rácsban (ahogyan a „direkt” fizikai mennyiségek az eredeti rácsban periodikusak),

$$\begin{aligned} \omega(\alpha, \mathbf{q}) &= \omega(\alpha, \mathbf{q} + \mathbf{g}) \\ \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) &= \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q} + \mathbf{g}), \end{aligned} \quad (1.27)$$

tehát elég e mennyiségeket a Brillouin-zónán belül ismerni. Azonnal látni fogjuk, hogy legtöbbször ennél sokkal kisebb \mathbf{q} tartományra szorítkozhatunk a további szimmetria tulajdonságok miatt. Negatív \mathbf{q} értékekre például (1.21) alapján

$$\mathbf{D}(-\mathbf{q}) = \mathbf{D}(\mathbf{q})^*, \quad (1.28)$$

tehát (1.24) konjugáltját képezve kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \omega(\alpha, \mathbf{q}) &= \omega(\alpha, -\mathbf{q}) \\ \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})^* &= \mathbf{f}(\alpha, -\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Ez a frekvenciák és polarizációs vektorok egy olyan szimmetriája, mely mindig teljesül. Megjegyezzük, hogy polarizációs vektorokra (1.29) helyett tulajdonképpen csak az következik, hogy $\mathbf{f}^*(\alpha, \mathbf{q})$ és $\mathbf{f}(\alpha, -\mathbf{q})$ egységnyi abszolút értékű komplex szorzó e rejéig megegyeznek. Mi ezt az arányossági tényezőt 1-nek választjuk, de

szokásos pl. a -1 választás is. Látható, hogy $\mathbf{q}=0$ -nál (1.28) miatt \mathbf{D} valós, ezért a polarizációs vektorok is valósak. A további szimmetriák következményeit ismét Bravais-rácsra szorítkozva részletezzük, amikor tehát $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ közönséges 3×3 komponensű mátrix. Ekkor (1.21b) és (1.14) alapján azt kapjuk, hogy

$$\tilde{\mathbf{R}} \cdot \sum \mathbf{G}(\mathbf{Rl}) e^{i(\mathbf{Rq})(\mathbf{Rl})} \cdot \mathbf{R} = \sum \mathbf{G}(\mathbf{l}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}}$$

minthogy

$$(\mathbf{Rq}) \cdot (\mathbf{Rl}) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{l},$$

vagyis a rács \mathbf{R} szimmetriája a

$$\tilde{\mathbf{R}} \mathbf{D}(\mathbf{Rq}) \mathbf{R} = \mathbf{D}(\mathbf{q}) \quad (1.30)$$

egyenlet teljesülését vonja maga után. Innen mindenekelőtt látjuk, hogy mivel minden Bravais-rácsot egy rácspontra, mint origóra vonatkozó inverzió önmagába visz át, \mathbf{R} helyébe az inverzió mátrixát írva:

$$\mathbf{D}(-\mathbf{q}) = \mathbf{D}(\mathbf{q}) \quad (\text{Bravais-rács}).$$

Ezt (1.28)-cal összevetve, azt látjuk, hogy Bravais-rácsnál a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrixok, és így a sajátvektorok is valósak. Ezután szorozzuk meg (1.30)-at \mathbf{R} -rel, akkor a

$$\mathbf{D}(\mathbf{Rq}) \mathbf{R} = \mathbf{R} \mathbf{D}(\mathbf{q}) \quad (1.31)$$

alakra jutunk.

Ez az egyenlet azt állítja, hogy ha $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ sajátvektora $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ -nak az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ sajátérték mellett, akkor $\mathbf{R}\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ viszont $\mathbf{D}(\mathbf{Rq})$ -nak sajátvektora ugyanazzal a sajátértékkel:

$$\mathbf{D}(\mathbf{Rq}) \mathbf{R}\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) = \mathbf{R} \mathbf{D}(\mathbf{q}) \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) = \omega(\alpha, \mathbf{q})^2 \mathbf{R}\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}).$$

Látható tehát, hogy ha \mathbf{R} szimmetriaművelet, akkor

$$\omega(\alpha, \mathbf{Rq}) = \omega(\alpha, \mathbf{q}) \quad (1.32)$$

$$\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{Rq}) \sim \mathbf{R} \cdot \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}). \quad (1.33)$$

A \sim jel itt értelemszerűen azt jelenti, hogy ha $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ nem elfajult, (1.33)-ban egyszerűen egyenlőséget kell írunk, ha pedig elfajult, akkor az $\omega(\alpha, \mathbf{Rq})$ -hoz tartozó alteret az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ -hoz tartozó altér \mathbf{R} transzformációjával kapjuk. Ezzel előttünk állnak az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ függvények összes szimmetria tulajdonságai, melyeket a következő ábrázolással tehetünk szemléletessé:

Szintvonalakhoz hasonlóan alkossuk meg azokat a felületeket a \mathbf{q} vektorok terében, melyeket az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ állandó érték jellemez. Ezek a felületek periodikusak a reciprok-rácsban, a középpontra tükrözve önmagukba mennek át, továbbá minden egyéb esetleges rács-szimmetria is önmagukba viszi át őket. Ezért például köbös szimmetriájú Bravais-rács esetében elég az $\omega = \omega(\alpha, \mathbf{q})$ összefüggést a Brillouin-zóna $1/48$ -ad részében ismerni, ezekből az értékekből az említett felületek eltolás, tükrözés és forgatás útján már felépíthetők. Az (1.33) egyenletek alapján ugyanez vonatkozik az $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ vektortér szimmetriáira is.

Bonyolultabb rács esetén teljesen hasonlóan látható be, hogy ha \mathbf{R} az egyensúlyi rács szimmetriája, akkor (1.32) teljesül, a polarizációs vektorokra pedig (1.33)-hoz hasonló, valamivel bonyolultabb összefüggés igaz. Ezek az eredmények igen

szemléletes tartalommal rendelkeznek a klasszikus mechanikai kép alapján: ekvivalens, szimmetrikus irányokba forgatott vagy tükrözött hullámszámhoz ugyanolyan frekvenciájú hullámok tartoznak, \mathbf{q} -hoz képest ugyanolyan állású polarizációs vektorokkal.

Hogy a fenti szimmetria tulajdonságok milyen komoly megszorítást jelentenek a sajátértékprobléma mennyiségeire nézve, azt jól mutatja az a tény, hogy bizonyos esetekben az (1.24) egyenlet megoldása nélkül, azonnal meg tudjuk mondani a polarizációs vektorok értékét.

Továbbra is a Bravais-rácsnál maradva, legyen \mathbf{q}_0 egy olyan hullámszámvektor, amelyet a R művelet változatlanul hagy:

$$R\mathbf{q}_0 = \mathbf{q}_0,$$

tehát például \mathbf{q}_0 mutasson az R forgatás tengelye irányába. Ekkor (1.31) értelmében

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}_0)\mathbf{R} = \mathbf{R}\mathbf{D}(\mathbf{q}_0),$$

tehát (1.33) szerint $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ -val együtt $\mathbf{R}\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ is sajátvektor ugyanazon sajátértékkel. Ha a forgatás, vagy tükrözés az $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ által kijelölt irányt nem hagyta változatlanul, bizonyos, hogy az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ sajátérték elfajult. Lássunk erre egy példát. Legyen a kristály köbös szimmetriájú és mutasson \mathbf{q}_0 a kocka egyik éle irányába. Válasszuk ki egy nem \mathbf{q}_0 irányába mutató sajátvektort, $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}_0)$ -t. Ekkor $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}_0)$ -lal együtt az él körül 90° -kal elforgatott $\mathbf{R}_1\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}_0)$ vektor is sajátvektora $\mathbf{D}(\mathbf{q}_0)$ -nak, és a kocka lapjára tükrözött $\mathbf{R}_2\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}_0)$ is az. Két eset lehetséges:

a) a háromvektor: \mathbf{f} , $\mathbf{R}_1\mathbf{f}$, $\mathbf{R}_2\mathbf{f}$ nincs egy síkban. Ekkor az $\omega(\alpha, \mathbf{q}_0)$ sajátértékhez találtunk 3 lineárisan független vektort, tehát háromszorosan elfajult: $\omega(1, \mathbf{q}_0) = \omega(2, \mathbf{q}_0) = \omega(3, \mathbf{q}_0)$,

b) a három vektor egy síkban van, tehát szükségképpen a \mathbf{q}_0 -ra merőleges síkban. A sajátértékprobléma ebben a síkban elfajult, vagyis két polarizációs vektor merőleges \mathbf{q}_0 -ra és $\omega(1, \mathbf{q}_0) = \omega(2, \mathbf{q}_0)$, a harmadik pedig az ortogonalitási feltételek miatt erre a síkra merőleges, tehát \mathbf{q}_0 irányú $\omega(3, \mathbf{q}_0)$ sajátértékkel.

Speciálisan kiderült tehát, hogy ha \mathbf{q}_0 szimmetrikus irányba, pl. egy 90° -os forgástengely irányába mutat, akkor 2 \mathbf{q}_0 -ra merőleges és 1 \mathbf{q}_0 -val párhuzamos polarizációs vektor van; szokásosan kifejezve két *transzverzális* és egy *longitudinális* polarizáció lehetséges. — Ez a tulajdonság csak a speciális, szimmetrikus \mathbf{q}_0 irányokra jellemző, egyébként a polarizációs vektorok \mathbf{q} -függése bonyolultabb. Anélkül tehát, hogy megoldottuk volna a sajátérték-egyenletet, sőt, egyáltalán nem ismerve a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ tenzor konkrét értékét, a polarizációs vektorokat a szimmetria-megszorítások alapján bizonyos speciális irányokban ismerjük. Ilyenkor természetesen a frekvenciákra felírt karakterisztikus egyenlet is egyszerűsödik. Az előbbi példákban koordinátarendszerünk tengelyét a kocka éle, tehát \mathbf{q}_0 irányában felvéve látjuk, hogy mivel az $(1, 0, 0)$ vektor, mely a longitudinális polarizációt adja, sajátvektor, a \mathbf{D} mátrix ilyen alakú:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & . & . \\ 0 & . & . \end{pmatrix},$$

tehát $\omega^2(\alpha, q)$ -t lineáris egyenletből számíthatjuk ki. — Bonyolultabb rácsok esetén a helyzet hasonló, ott azonban az $f(\alpha, \mathbf{q})$ vektorok általában komplexek. Ezért a polarizációs vektorokra vonatkozó (1.33)-nak megfelelő összefüggések [3] kevésbé szemléletesek.

4. A rácsrezgések kvantumai, a fononok

Térjünk most vissza az (1.5) Hamilton-függvényhez. Ebből a kristály Hamilton-operátorát úgy kapjuk, hogy az $\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)$ és $\hat{\mathbf{p}}_k^l(t)$ változók helyébe kanonikusan konjugált operátorokat írunk

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum (\hat{\mathbf{p}}_k^l)^2 + \frac{1}{2} \sum_{l,k} \sum_{l',k'} \hat{\mathbf{u}}_k^l \mathbf{G}_{kk'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}') \hat{\mathbf{u}}_{k'}^{l'} + \dots, \quad (1.34)$$

ahol

$$\hat{\mathbf{p}}_k^l = \frac{1}{\sqrt{M_k}} \hat{\mathbf{p}}_k^l; \quad \hat{\mathbf{u}}_k^l = \sqrt{M_k} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k^l \quad (1.35)$$

és a csererelációk:

$$[\hat{\mathbf{p}}_{k,\gamma}^l, \hat{\mathbf{u}}_{k,\gamma'}^l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{k,k'} \delta_{l,l'} \delta_{\gamma,\gamma'}.$$

A $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ tenzorok természetesen nem változnak, mindaz, amit eddig elmondunk róluk, érvényben marad, továbbá egyszerűen átvesszük az (1.6) jelöléseket is, ugyanúgy definiálva egyszerű és összetett rács esetére is a $\hat{\mathbf{u}}^l$ és $\hat{\mathbf{p}}^l$ vektorokat. Céltünk most az lesz, hogy megtaláljuk az $\hat{\mathbf{u}}_{k,\gamma}^l$, $\hat{\mathbf{p}}_{k,\gamma}^l$ mennyiségeknek azokat a lineáris kombinációit, melyekkel az energiaoperátor

$$H = \frac{1}{2} \sum \hat{Y}_s^2 + \omega_s^2 X_s^2$$

alakba írható, ahol \hat{Y}_s az \hat{X}_s változóhoz konjugált impulzus operátora. Ez más szóval azt jelenti, hogy az energiát független harmonikus oszcillátorok energiáinak összegeként állítjuk elő: az energiaoperátort diagonalizáljuk. Jól ismeretes, hogy ez a feladat a \mathbf{G} tenzor (1.9) tulajdonsága miatt tisztán algebrai úton megoldható, és egyenértékű a tenzor sajátértékproblémájának megoldásával: az ω_s^2 mennyiségek éppen a dinamikai tenzor sajátértékei, az \hat{X}_s és $\hat{\mathbf{u}}_{k,\gamma}^l$ operátorok közötti leképezést pedig a sajátvektorok létesítik. Mi most a közvetlenebb utat választjuk, és az $\hat{\mathbf{u}}_k^l, \hat{\mathbf{p}}_k^l$ mennyiségekből kiindulva egyre újabb transzformációk segítségével más változókra térünk át, utolsó lépésként megtalálva az \hat{X}_s, \hat{Y}_s operátorokat. Az első lépést ezen az úton a következő megfontolás szolgáltatja:

Az (1.34) energia-kifejezés második tagja változatlan marad, ha az \mathbf{l}_1 cellában levő mag kitérésének helyébe az $\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}$ -ik cella kitérését írjuk, szélső magok esetén a periodikus határfeltételnek megfelelően járva el. Ezt az invarianciát a $\mathbf{G}_{k,k'}(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ tenzorok (1.13) tulajdonságai biztosítják. Másrészt ez az egész rácsnak egy \mathbf{l} rácsvektorral való eltolását jelenti, ezek az eltolások pedig, mint műveletek, csoportot alkotnak. Ennek a csoportnak egy eleme úgy hat a kitérés-vektorokra, hogy az (1.6) alatt definiált $\hat{\mathbf{u}}^{\mathbf{l}_1}$ vektoroknál az

$$\hat{\mathbf{u}}^{\mathbf{l}_1} \rightarrow \hat{\mathbf{u}}^{\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}}$$

felcserélést hozza létre.

A csoportelmélet jólismert tétele azonban (ld. pl. [4]) biztosítja, hogy elkészíthetők az $\hat{\mathbf{u}}^l$ vektoroknak olyan lineáris kombinációi, melyek a fenti művelet hatására már nem cserélődnek egymás között, csupán egy e^{iq^l} komplex számmal szorozódnak, és itt \mathbf{q} hullámszámvektor. Legyen egy ilyen kombináció jele $\hat{\eta}(\mathbf{q})$. Tegyük fel, hogy előállítottuk a potenciális energiát a

$$V = \sum \hat{\eta}(\mathbf{q}_1) F(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \hat{\eta}(\mathbf{q}_2)$$

alakban és úgy választottuk meg az $\hat{\mathbf{u}}^l$ kitéréseket, hogy csak mondjuk $\hat{\eta}(\mathbf{q})$ és $\hat{\eta}(\mathbf{q}')$ különbözzék 0-tól. Világos, hogy minden $F(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ együttható 0 kell, hogy legyen, kivéve $F(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ -t, hiszen az $\hat{\mathbf{u}}^{l_1} \rightarrow \hat{\mathbf{u}}^{l_1-1}$ helyettesítés hatására a potenciális energia $\exp\{(iq + iq')l\}$ -val szorozódik, és az előbb láttuk, hogy invariánsnak kell maradnia. Éppen ezért természetes, hogy első lépésként megkeressük ezeket az $\hat{\eta}$ lineáris kombinációkat, mivel velük az energia már aránylag egyszerűen írható fel. Rögtön látható, hogy a következő mennyiségek rendelkeznek a kívánt transzformációs tulajdonsággal:

$$\hat{\eta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N^{3/2}} \sum_l e^{iq^l} \cdot \hat{\mathbf{u}}^l \quad (1.36a)$$

és legyen egyidejűleg

$$\hat{\pi}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N^{3/2}} \sum_l e^{-iq^l} \cdot \hat{\mathbf{p}}^l, \quad (1.36b)$$

ahol \mathbf{q} végigfut a Brillouin-zóna hullámvektorain. Ha az (1.20) összefüggéseket felhasználva ezekkel a mennyiségekkel írjuk fel az energiát, a várakozásnak megfelelően N^3 db tag egyszerű összegét nyerjük:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{H}(\mathbf{q}); \quad \hat{H}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \hat{\pi}(-\mathbf{q}) \cdot \hat{\pi}(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \hat{\eta}(-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{q}) \cdot \hat{\eta}(\mathbf{q}),$$

ahol megjelent a $\mathbf{G}(\mathbf{l} - \mathbf{l}')$ dinamikai tenzor transzformáltja, az előző pontban részletesen vizsgált $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrix.** A csererelációkat felírva könnyen igazolható az is, hogy $\hat{\pi}$ és $\hat{\eta}$ konjugált mennyiségek:

$$[\hat{\pi}(\mathbf{q})_i, \hat{\eta}(\mathbf{q})_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \cdot \delta_{i,j}. \quad (1.37)$$

A diagonalizálás problémájában ezzel annyira kihasználtuk a translációs invarianciát, amennyire ez lehetséges: az összegnek N^3 tagra való szétesése az (1.13) feltételek egyenes következménye. A sajátértékprobléma óriási mértékben egyszerűsödött, hiszen most már elegendő a $3p \times 3p$ dimenziós $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrixok sajátérték-egyenletét megoldanunk, hogy célunkat elérjük. Tegyük fel ugyanis, hogy ez sikerült, és a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrix esetleges szimmetria-tulajdonságait felhasználva kezünkben vannak az $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ sajátértékek és az $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ sajátvektorok. Képezzük akkor a

** Emlékeztetünk arra, hogy összetett rács esetén $\hat{\mathbf{u}}^l \hat{\mathbf{p}}^l \hat{\pi}, \hat{\eta}$ $3p$ dimenziós vektorok, a szereplő $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ pedig a $3p \times 3p$ dimenziós, (1.23) alatt definiált tenzor.

következő új mennyiségeket:

$$\begin{aligned}\hat{Q}_{\alpha,q} &= \sum_i f(\alpha, \mathbf{q})_i^* \hat{\eta}(\mathbf{q})_i \\ \hat{P}_{\alpha,q} &= \sum_i f(\alpha, \mathbf{q})_i \hat{\pi}(\mathbf{q})_i.\end{aligned}\quad (1.38)$$

Ezek segítségével az energia

$$\hat{H} = \sum_{\alpha,q} \hat{H}_{\alpha,q}; \quad \hat{H}_{\alpha,q} = \frac{1}{2} \hat{P}_{\alpha,q}^+ \cdot \hat{P}_{\alpha,q} + \frac{1}{2} \omega(\alpha, \mathbf{q})^2 \hat{Q}_{\alpha,q}^+ \cdot \hat{Q}_{\alpha,q} \quad (1.39)$$

alakú lesz (a leképezés megfordításához a (1.26) képleteket használtuk fel), és a felcserélési összefüggések:

$$[\hat{P}_{\alpha,q}, \hat{Q}_{\alpha',q'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{q,q'}. \quad (1.40)$$

Az új mennyiségek nem hermitikusak, és a definíció szerint teljesítik az (1.39) felírásakor már fel is használt

$$\hat{Q}_{\alpha,q}^+ = \hat{Q}_{\alpha,-q}; \quad \hat{P}_{\alpha,q}^+ = \hat{P}_{\alpha,-q} \quad (1.41)$$

feltételeket. Vezessük be éppen ezért a

$$\hat{X}_{\alpha,q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_{\alpha,q} + \hat{Q}_{\alpha,q}^+); \quad \hat{X}_{\alpha,q} = -\frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_{\alpha,q} - \hat{Q}_{\alpha,q}^+) \quad (1.42a)$$

és

$$\hat{Y}_{\alpha,q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{P}_{\alpha,q} + \hat{P}_{\alpha,q}^+); \quad \hat{Y}_{\alpha,q} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{P}_{\alpha,q} - \hat{P}_{\alpha,q}^+) \quad (1.42b)$$

hermitikus operátorokat, és értelmezzük őket a Brillouin-zóna egyik, mondjuk $q_z \geq 0$ által jellemezett felében. Láthatóan az \hat{Y} és \hat{X} változók konjugált impulzus és koordináta szerepet játszanak:

$$[\hat{Y}_s, \hat{X}_{s'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{s,s'}; \quad [\hat{Y}_s, \hat{X}_{s'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{s,s'}. \quad (1.43)$$

Ezzel természetesen a szabadsági fokok száma nem változott, hiszen a Brillouin-zóna felében változik ugyan a \mathbf{q} argumentum, de minden (\mathbf{q}, α) értékhez két koordináta-impulzus páros tartozik. Írjuk most fel ezekkel a mennyiségekkel az energiát: (1.39) és (1.42) alapján

$$\hat{H} = 2 \cdot \sum_{\alpha,q \geq 0} \hat{H}_{\alpha,q}; \quad 2\hat{H}_{\alpha,q} = \{\hat{Y}_{\alpha,q}^2 + \hat{Y}_{\alpha,q}^2 + \omega(\alpha, \mathbf{q})^2 (\hat{X}_{\alpha,q}^2 + \hat{X}_{\alpha,q}^2)\}. \quad (1.44)$$

Ezek a képletek azt jelentik, hogy elértük a fejezet elején kitűzött célunkat: sikerült az (1.34) energiát harmonikus oszcillátorok energiájának összegeként előállítani. Látszik egyébként az is, hogy az $\omega(\alpha, \mathbf{q})^2$ mennyiségek, amelyek az (1.39) energia-kifejezésben jelentek meg, mint a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrixok sajátértékei, valóban a \mathbf{G} sajátértékei is egyben, tehát jogosan előlegeztük a 3. pontban róluk, hogy pozitívok. Külön figyelmet érdemel azonban a $\mathbf{q}=0$ eset. Ilyenkor egyrészt (1.41) és (1.42) szerint

$$\hat{X}_{\alpha,q} = \hat{Y}_{\alpha,q} = 0,$$

másrészt tudjuk, hogy három frekvencia értéke 0:

$$\omega(1, 0) = \omega(2, 0) = \omega(3, 0) = 0.$$

Az ehhez a három polarizációhoz tartozó $\hat{X}_{\alpha,0}$ mennyiségeket könnyű megadni: (1.36), (1.38) és (1.42) alapján

$$\hat{X}_{\alpha,0} = \sqrt{2} \frac{1}{N^{3/2}} \sum_{l,i} f(\alpha, 0)_i^* \hat{u}_i^l \quad (\alpha = 1, 2, 3).$$

A szereplő polarizációs vektorok értékét azonban ismerjük, az (1.25) képlet levezetésekor már szerepeltek. Figyelembevéve még az (1.35) definíciót is, azt kapjuk, hogy

$$\hat{X}_{\alpha,0} = \text{konst} \cdot \mathbf{R}_0|_{\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (1.45)$$

ahol \mathbf{R}_0 a kristály tömegközéppontját jelöli. Ez ismét azt a körülményt hangsúlyozza, hogy a három $\omega = 0$ frekvencia a kristály, mint egész mozgásával kapcsolatos: az ezzel kapcsolatos „oszcillátor” mozgása valójában nem periodikus, hanem szabad mozgás. (A merev test típusú forgás szabadsága a periodikus határfeltételek miatt természetesen megszűnt. Ez azonban éppúgy nem vezet valódi hibára, mint a periodikus határfeltétellel kapcsolatos többi „ellentmondás”).

Válasszuk ezért külön a translációval kapcsolatos szabad mozgást a Hamilton-operátorban is:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{Y}_{1,0}^2 + \hat{Y}_{2,0}^2 + \hat{Y}_{3,0}^2) + \frac{1}{2} \sum'_{\alpha, q, z \neq 0} [\hat{Y}_{\alpha, q}^2 + \hat{Y}_{z, q}^2 + \omega(\alpha, \mathbf{q})^2 (\hat{X}_{\alpha, q}^2 + \hat{X}_{z, q}^2)], \quad (1.46)$$

ahol az összegezésben tehát csupa valódi oszcillátor szerepel, erre utal a Σ' jelölés. — A klasszikus és kvantummechanikai tárgyalás ezen a ponton kettéválk. Mindaddig a végzett lineáris transzformációk kanonikus volta miatt lényegtelen volt, hogy a koordináták és impulzusok operátorok-e vagy sem, a képletben az operátorokat klasszikus mennyiségeknek tekintve a klasszikus mechanikai mozgásegyenletekhez juthatunk. Ezek az egyenletek az X és Y mennyiségek harmonikus rezgőmozgását eredményezik, és velük az \mathbf{u}_k^l és \mathbf{p}_k^l vektorokat kifejezve a problémát meg is oldottuk.

A kvantummechanikában ezzel szemben a kristály állapotát a hullámfüggvényével jellemezhetjük. Mivel a szereplő oszcillátorok függetlenek, ez a függvény a következő szorzat alakjában írható:

$$\psi = \text{konst} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{R}} \cdot \varphi_{m_1}(X_1) \varphi_{\bar{m}_1}(\bar{X}_1) \dots \varphi_{\bar{m}_s}(\bar{X}_s), \quad (1.47)$$

ahol \mathbf{P} a tömegközéppont impulzusa, m_i, \bar{m}_i ($i = 1 \dots 3N^3p - 3$) egészek az egyes X és \bar{X} oszcillátorok gerjesztési fokát jelentik, és [5]

$$\varphi_m(X) = \text{konst} \cdot e^{-\frac{\omega}{2\hbar} X^2} \cdot H_m \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} X \right) \quad (1.48)$$

az ismert oszcillátor-sajátfüggvények, $H_m(X)$ az m -ik Hermite-polinom. Az is jól ismeretes, hogy ez energiát a fenti állapotban a

$$E = E_{tr} + \sum_{\alpha, q, z \equiv 0} \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q}) [m_{\alpha, q} + \bar{m}_{\alpha, q} + 1] \quad (1.49)$$

kifejezés adja, itt E_{tr} -val a kristály translációs kinetikus energiáját jelöltük, a zárójelben levő 1 az \hat{X} és $\hat{\bar{X}}$ oszcillátorok $\frac{1}{2} \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q})$ nullponti energiája miatt jelenik meg. A harmonikus oszcillátor tárgyalásánál célszerű az $\hat{\bar{X}}$ és \hat{X} operátorok helyett az ún. keltő és eltüntető operátorok [6] használata, melyeket a

$$\begin{aligned} \hat{X}_{\alpha, q} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\alpha, \mathbf{q})}} (\hat{b}_{\alpha, q} + \hat{b}_{\alpha, q}^+) & \hat{\bar{X}}_{\alpha, q} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\alpha, \mathbf{q})}} (\hat{b}_{\alpha, q} - \hat{b}_{\alpha, q}^+) \\ \hat{Y}_{\alpha, q} &= i \sqrt{\frac{\hbar \omega(\alpha, \mathbf{q})}{2}} (\hat{b}_{\alpha, q} - \hat{b}_{\alpha, q}^+) & \hat{\bar{Y}}_{\alpha, q} &= i \sqrt{\frac{\hbar \omega(\alpha, \mathbf{q})}{2}} (\hat{b}_{\alpha, q} + \hat{b}_{\alpha, q}^+) \end{aligned} \quad (1.50)$$

képletekkel definiálnak. A leképezés segítségével a felcserélési összefüggésekre (1.43) alapján a

$$[\hat{b}_{\alpha, q}, \hat{b}_{\alpha', q'}^+] = [\hat{\bar{b}}_{\alpha, q}, \hat{\bar{b}}_{\alpha', q'}^+] = \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{q, q'} \quad (1.51)$$

kifejezés adódik. Ezek az operátorok a φ_m állapotból a φ_{m+1} , illetve φ_{m-1} állapotokba „visznek át”, eggyel növelik, illetve csökkentik az oszcillátor gerjesztettségi fokát. Segítségükkel az energia a

$$\hat{H} = \hat{E}_{tr} + \sum'_{\alpha, q, z \equiv 0} (\hat{m}_{\alpha, q} + \hat{\bar{m}}_{\alpha, q} + 1) \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q}) \quad (1.52)$$

alakba írható, ahol az $\hat{m}_{\alpha, q} = \hat{b}_{\alpha, q}^+ \cdot \hat{b}_{\alpha, q}$ és $\hat{\bar{m}}_{\alpha, q} = \hat{\bar{b}}_{\alpha, q}^+ \cdot \hat{\bar{b}}_{\alpha, q}$ operátoroknak az (1.48) állapot sajátállapota az $m_{\alpha, q}$ és $\bar{m}_{\alpha, q}$ egész szám sajátértékkel. Az állapotfüggény megadása helyett a

$$|\mathbf{P}\rangle = |\dots m_{\alpha, q}, \bar{m}_{\alpha, q}, \dots\rangle \quad (1.53)$$

jelölést fogjuk használni az állapot jellemzésére, vagyis megadjuk a tömegközéppont impulzusát, és azt, hogy az $\hat{X}_{\alpha, q}$ illetve $\hat{\bar{X}}_{\alpha, q}$ oszcillátorok melyik nívón vannak gerjesztve. A \hat{b} , $\hat{\bar{b}}$ illetve \hat{b}^+ , $\hat{\bar{b}}^+$ operátorok hatása abban áll egy ilyen állapotban, hogy az m , \bar{m} számokat 1-gyel csökkentik, illetve növelik. — Ha minden oszcillátor alapállapotban van, bármely \hat{b} és $\hat{\bar{b}}$ esetén

$$\hat{b}_{\alpha, q} |\dots 0 \dots\rangle = \hat{\bar{b}}_{\alpha, q} |\dots 0 \dots\rangle = 0. \quad (1.54)$$

Gondoljuk most meg, hogy az alapállapot kivételével valamennyi energianívó elfajult, minthogy az energia csak az $(m_{\alpha, q} + \bar{m}_{\alpha, q})$ összegektől függ, külön-külön az egyes $m_{\alpha, q}$ számoktól nem. Ilyen esetekben keltő és eltüntető operátorokat nemcsak a (1.50) összefüggésekkel lehet definiálni [6].

Valóban, például a

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\alpha, q} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{\alpha, q} + i \hat{\bar{b}}_{\alpha, q}) \\ \hat{a}_{\alpha, -q} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{\alpha, q} - i \hat{\bar{b}}_{\alpha, q}) \end{aligned} \quad (1.55)$$

operátorok, melyeket láthatóan az egész Brillouin-zónában definiálnak a fenti egyenletek, szintén keltő és eltüntető tulajdonságúak:

$$[\hat{a}_{\alpha,q}, \hat{a}_{\alpha,q}^+] = \delta_{\alpha,\alpha} \delta_{q,q'} \quad (1.56)$$

és velük az energia kifejezése

$$\hat{H} = E_{tr} + \sum_{\alpha, q, z \equiv 0} \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q}) (\hat{n}_{\alpha,q} + \hat{n}_{\alpha,-q} + 1) = E_{tr} + \sum_{\alpha, q} \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q}) (\hat{n}_{\alpha,q} + \frac{1}{2}) \quad (1.57)$$

alakú lesz, az $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$ operátor sajátértékei a 0, 1, ... egész számok. Érdekes felírni az új operátorokkal a \hat{Q} , \hat{P} mennyiségeket is:

$$\hat{Q}_{\alpha,q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\alpha, q)}} (\hat{a}_{\alpha,q} + \hat{a}_{\alpha,-q}^+); \quad \hat{P}_{\alpha,q} = i \sqrt{\frac{\hbar \omega(\alpha, q)}{2}} (\hat{a}_{\alpha,q}^+ - \hat{a}_{\alpha,-q}). \quad (1.58)$$

Közismert, hogy a (1.57) energiaoperátor sajátállapotai

$$|\mathbf{P}\rangle = |\dots n_{\alpha q} \dots\rangle$$

alakba írhatók, az (α, \mathbf{q}) értékhez (1.55) alapján most már egyértelműen hozzárendelt oszcillátor gerjesztettségi foka $n_{\alpha,q}$ és \hat{a}^+ , \hat{a} operátorok ezt növelik, illetve csökkentik 1-gyel. — Mint láttuk, az

$$E_0 = \sum_{\alpha, q, z \equiv 0} \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q})$$

energiájú állapot nem elfajult, tehát az (1.54) egyenlettel jellemzett alapállapot és az

$$\hat{a}_{\alpha q} |\dots 0 \dots\rangle = 0 \quad (\alpha, \mathbf{q})$$

állapot megegyeznek. Kérdés azonban, hogy pl. a

$$\hat{a}_{\alpha,q}^+ |\dots 0 \dots\rangle = |\dots 1 \dots\rangle$$

állapotban, mikor tehát az (α, q) oszcillátor az első nívón van, az \hat{X} vagy az $\hat{\bar{X}}$ típusú (más szóval \hat{b} vagy $\hat{\bar{b}}$ típusú) oszcillátor van-e gerjesztve. Az (1.55) leképezés alapján világos, hogy sem egyik, sem másik esetről nincs szó, az $\hat{a}_{\alpha q}^+$ operátor az \hat{X} és $\hat{\bar{X}}$ típusú oszcillátorok szuperpozícióját gerjeszti, és fordítva, ahhoz, hogy egy pl. \hat{X} típusú gerjesztést hozzunk létre, az $\hat{a}_{\alpha,q}^+$ és $\hat{a}_{\alpha,q}^+$ operátorok szuperpozícióját kell alkalmaznunk.

A kétféle leírás teljesen egyenrangú, az egyszerűbb állapotfüggvényeket az X , \bar{X} oszcillátorok segítségével kapjuk, azonban az \hat{a}^+ , \hat{a} operátorok, mint mindjárt látni fogjuk, rendkívül egyszerű transzformációs tulajdonságaik miatt előnyösebben alkalmazhatók.

Térjünk most rá az időtől függő Heisenberg-operátorok használatára. Az operátorokra vonatkozó mozgásegyenlet:

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}] = -i\omega\hat{a}.$$

Ennek megoldása nyilvánvalóan:

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0) e^{-i\omega t} \quad (1.60)$$

Fejezzük ki most az új változókkal a \hat{u}_k^l mennyiségeket. Először is (1.26), (1.58) és (1.60) segítségével (1.38)-ból ($\hat{a}(0)$ helyett röviden \hat{a} -t írva)

$$\eta(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\alpha, \mathbf{q})}} (\hat{a}_{\alpha, \mathbf{q}} e^{-i\omega(\alpha, \mathbf{q})t} + \hat{a}_{\alpha, -\mathbf{q}}^+ e^{i\omega(\alpha, \mathbf{q})t}).$$

Térjünk vissza háromdimenziós jelöléseinkhez. Ezért jelöljük a vektorok 3—3 komponensét összefoglalóan így:

$$\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) = (\mathbf{e}_1(\alpha, \mathbf{q}), \mathbf{e}_2(\alpha, \mathbf{q}), \dots, \mathbf{e}_p(\alpha, \mathbf{q})).$$

Ezután (1.36) megfordításával (1.20)-at és (1.35)-öt felhasználva):

$$\hat{u}_k^l(t) = \frac{1}{N^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_k}} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{\omega(\alpha, \mathbf{q})}} \{ \mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}l - i\omega(\alpha, \mathbf{q})t} \hat{a}_{\alpha, \mathbf{q}} + h.c. \} \quad (1.61)$$

és hasonló kifejezés érvényes $\hat{p}_k^l(t)$ -re is.**

Hasonló alakhoz jutunk a klasszikus mechanikai tárgyalás során is, mindössze az (1.50) leképezésben kell a $\sqrt{\hbar} \hat{a}_{\alpha, \mathbf{q}}$ operátor helyett az $A_{\alpha, \mathbf{q}}(t)$ amplitúdót írni. Ennek időfüggése olyan, mint az $\hat{a}_{\alpha, \mathbf{q}}$ operátoré, tehát a

$$u_k^l(t) = \frac{1}{N^{3/2}} \sqrt{\frac{1}{2M_k}} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{\omega(\alpha, \mathbf{q})}} \{ \mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}l - i\omega(\alpha, \mathbf{q})t} \cdot A_{\alpha, \mathbf{q}}(0) + \text{kompl konj} \}$$

kifejezéshez jutunk, itt az $A_{\alpha, \mathbf{q}}(0)$ számok a kezdeti feltételből nyerhető állandók. A kapott eredmények a klasszikus mechanika nyelvén tehát a következőt jelentik: A harmonikus kristály atomjainak mozgása a kristályon \mathbf{q} hullámszámmal és a hozzá tartozó $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ frekvenciával végighaladó síkhullámok szuperpozíciójaként állítható elő. Minden hullámszámhoz a lehetséges frekvenciákat a

$$\mathbf{D}(\mathbf{q})\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q}) = \omega(\alpha, \mathbf{q})^2 \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$$

összefüggésből kapjuk meg. Minthogy továbbá (1.17) miatt $e^{i\mathbf{q}l} = 1$, és az összes szereplő q -tól függő mennyiség periodikus a reciprokrácsban, a *reciprok-rács vektorban eltérő hullámok ugyanolyan kitérésekre vezetnek*. Az egyes atomok kitérésének irányát és a különböző polarizációjú rezgésekben való részvétel arányát a $\mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q})$ polarizációs vektorok szabják meg. A komplex írásmódról persze valós mennyiségekre térhetünk át. Ekkor $u_k^l(t)$ valós, állóhullámok szerinti sorához jutunk. Ennek az állóhullámok szerinti sorfejtésnek az együtthatói éppen a \hat{b}, \hat{b}^+ operátoroknak megfelelő klasszikus mennyiségek. A kvantummechanikai tárgyalásban ilyenféle szemléletesség nem adható, ehelyett azonban a megoldáshoz egészen más jellegű, igen egyszerű képet kapcsolhatunk. Azt a tényt ugyanis, hogy a $\hbar\omega(\alpha, \mathbf{q})$ energiájú oszcillátor a $n_{\alpha, \mathbf{q}}$ -dik nívón van gerjesztve, úgy is értelmezhetjük, hogy a megfelelő $\hbar\omega(\alpha, \mathbf{q})$ energiájú állapotban $n_{\alpha, \mathbf{q}}$ db „részcseke” van jelen, és az oszcillátor gerjesztésekor egy „részcseke” keletkezik, alacsonyabb nívóra való átmenetnél pedig egy „részcseke” eltűnik. Mivel továbbá adott (α, \mathbf{q}) állapotban tetszőlegesen sok

** A h. c. hermitikus adjungált operátort jelent.

„részecske” tartózkodhat, az (1.57) energiaoperátor Bose—Einstein statisztikát követő, kölcsönhatásmentes kvantumokból, ún. kvázirészekből álló „gáz” energiaoperátorként fogható fel. A kristálynak ezeket a kvázirészeit fonon-nak nevezik.

Az, hogy a fenti analógia a valódi részecskékkal mennyire szerencsés, leginkább onnan látszik, hogy a fonon „kvázi-impulzussal” is rendelkezik. Ezen azt értjük, hogy a \mathbf{q} hullámszám bizonyos értelemben impulzusként viselkedik. Vizsgáljuk meg például a $P=0$ esetén az

$$a_{x,q}^+ | \dots 0 \dots \rangle$$

egyfononos állapot viselkedését, ha a kristályt egy \mathbf{l} rácsvektorral eltoljuk. Mindenekelőtt könnyű belátni, hogy az eltolásnak megfelelő $\mathbf{u}^l \rightarrow \mathbf{u}^{l-1}$ helyettesítéssel szemben a $| \dots 0 \dots \rangle$ állapot invariáns. Ez azért van így, mert a „fonon-vákuum” állapotfüggvénye (1.48) alapján

$$\exp \left\{ -\frac{\omega}{2\hbar} (X^2 + \bar{X}^2) \right\}$$

alakú kifejezések szorzata, az $X^2 + \bar{X}^2$ kifejezés transzformációs tulajdonságai viszont (1.42) miatt ugyanolyanok, mint az invariáns $\hat{Q}_{x,q} \hat{Q}_{x,q}^+$ operátoroké. Elég tehát az $\hat{a}_{x,q}^+$ operátort transzformálni, és (1.36), (1.38) és (1.58) alkalmazásával az

$$\mathbf{u}^l \rightarrow \mathbf{u}^{l-1}$$

helyettesítéskor azt kapjuk, hogy

$$\hat{a}_{x,q}^+ | \dots 0 \dots \rangle \rightarrow e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}} \hat{a}_{x,q}^+ | \dots 0 \dots \rangle. \quad (1.62)$$

Ha arra gondolunk, hogy szabad részecske hullámfüggvénye eltoláskor az $e^{i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\mathbf{r}}$ tényezővel szorozódik, látjuk, hogy a $\hbar\mathbf{q}$ fonon esetén az impulzushoz hasonló szerepet játszik.

Rögzítsük most a tömegközéppontot, tehát írjunk mind \hat{E}_{tr} mind \mathbf{P} helyére 0-t. Ekkor azonnal látszik, hogy mind az egyes magok impulzusa, mind az összimpulzus átlagosan eltűnik adott fononszámú állapotban, hiszen ezek az impulzusok \hat{a} és \hat{a}^+ operátorok lineáris kombinációként állíthatók elő. Valódi impulzus tehát csak a tömegközéppont translációs mozgásából eredhet, a kváziimpulzus nem impulzus. Mégis, a kristály (1.62) által kifejezett translációs szimmetriája arra vezet, hogy fononok valódi részecskékkal, vagy egymással való kölcsönhatásakor a kváziimpulzusok és a valódi impulzusok összege „majdnem” megmarad. Pontosabban, mint ezt a neutron-fonon kölcsönhatás példáján látni fogjuk, igaz az, hogy a folyamat elején és végén az impulzusok és kváziimpulzusok összege reciprokrács vektorban térhet csak el:

$$\Sigma \mathbf{p}_k + \Sigma \hbar \mathbf{q}_k \equiv \Sigma \mathbf{p}_v + \Sigma \hbar \mathbf{q}_v \quad (\text{mod } \mathbf{g}),$$

ahol \mathbf{p}_k , \mathbf{p}_v a résztvevő valódi részek impulzusa a folyamat kezdetén illetve végén, $\hbar \mathbf{q}_k$, $\hbar \mathbf{q}_v$ pedig a szereplő fononok kváziimpulzusait jelenti. Ennek a „megmaradási” tételnek a kapcsán persze felmerül a kérdés, hová „tűnik el” fonon gerjesztésekor az az impulzus, amit az ütköző részecske ténylegesen elveszített, hiszen a fonon kváziimpulzusa ezért, mint láttuk, nem felelős. Világos, hogy impulzus felvételére egyedül a tömegközéppont mozgását leíró „0-frekvenciájú oszcillátor” képes. Ezt azonban a tömegközéppont rögzítésekor a tárgyalásból kirekesztettük, tehát

az impulzus megmaradásának tételét a részecske-kristály rendszerre nem alkalmazhatjuk. Látható egyébként, hogy ha a kristályt nem rögzítettük volna, a tömegközépponti impulzus megváltozásán kívül semmi érdekeset nem tapasztalhatnánk. Rendkívül lényeges azonban az a körülmény, hogy a *tömegközépponti mozgásnak átadott impulzust semmiképpen sem kíséri a tömegközéppontnak átadott energiaátadás*, mert rögzített kristály esetén ez pontosan 0, szabad kristály esetén a neutron és kristály tömegének aránya miatt elenyésző. Eszerint a *részecskékkel (neutron, fonon stb.) kölcsönható kristály tetszőleges impulzust vehet fel esetleg energiaváltozás nélkül, de mindenkor a kváziimpulzus és energia megmaradása által megszabott mértékben*. Ezért a részecske által leadott energia és impulzus egészen más összefüggésben állnak egymással, mint pl. két valódi részecske ütközése esetén. Ez a sokrészecske-rendszerek fonon-szerű, ún. elemi gerjesztéseire általában jellemző, és a kölcsönható kristály legjellemzőbb dinamikai tulajdonsága, ezen alapul a Mössbauer-effektus is.

A meghatározott kváziimpulzussal és energiával, valamint a polarizációval rendelkező, kölcsönhatásmentes fonongáz modell széles hőmérsékleti tartományban használható. A hőmérsékletet emelve azonban a rezgések egyre inkább anharmonikussá válnak, nem állhatunk már meg az (1.5) sorfejtésben a másodrendű tagoknál. A tapasztalat szerint azonban ekkor is jó kiindulást jelent a harmonikus közelítés, az anharmonicitás perturbációs módszerekkel vehető tekintetbe. Röviden vázoljuk a helyzetet ebben az esetben [7]. A potenciális energia sorfejtésében továbbmenve u_k^l magasabb hatványai, tehát az \hat{a} , \hat{a}^+ operátorok többszörös szorzatai jelennek meg:

$$\hat{H} = \hat{H}(\text{harm}) + \sum c_{ikl} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \hat{a}_l + \dots \quad (1.63)$$

Ez azt jelenti, hogy az adott részecskeszámú állapotot a Hamilton-operátornak nem sajátállapota többé, a Hamilton-operátor átvizsgálja az egyfononos stb. állapotból a 2, 3 stb. fononos állapotokba, ezek az állapotok tehát az idő folyamán egymással keverednek. A második tag jelenléte arra vezet, hogy *meghatározott idő múlva bekövetkezik a (α, q) által jellemzett fonon szétesése két, ill. több fononra, a kváziimpulzus megmaradása mellett*. Ez az idő a fonon élettartama. Az anharmonikus folyamatok kissé megváltoztatják és kiszélesítik a fononok eddig jól meghatározott energianívóit, a fononokkal kölcsönható részecske (pl. neutron) éles energia-változásai kissé „elkenődnek”.

A neutron-fonon kölcsönhatás alább következő tárgyalásában harmonikus közelítésre szorítkozunk, mivel az anharmonikus effektusok tárgyalása túl messzire vezetne [8], [36], másfelől a kölcsönhatás lényeges sajátosságai már így is jól látszanak.

5. Fononok kísérleti vizsgálata és az elmélet ellenőrzésének lehetőségei

A fent tárgyalt Born—Kármán-féle fonon-képben alapvető szerep jutott a dinamikai tenzornak. Valamennyi dinamikai paraméter, a frekvenciák és polarizációk meghatározása az eddig követett úton aránylag egyszerű, ha a \mathbf{G} tenzor elemeit ismerjük. Ezeknek a tenzorelemeknek, az ún. erőkonstansoknak a meghatározására két lehetőség kínálkozik. Az egyik a definíciókat követi: határozzuk meg adiabatikus közelítésben az elektron-állapot energiáját, differenciáljuk és megkapjuk a dinamikai tenzort. Világos, hogy ez csak akkor járható út, ha valami egyszerű elképzelésünk eleve van az illető kristályt összetartó erőkről; tehát ionos, vagy molekula-kristályok esetében. Fémeknél, ahol a helyzet bonyolultabb, ahol

nem elektrosztatikus vagy van der Waals-típusú erőkkel kell csak számolni, az erőkonstansok közvetlen kiszámítása a definíciók alapján rendkívül nehéz. Ennek ellenére a több fém esetén léteznek ilyen számítások [9] és a kiszámított diszperziós összefüggéseket a kísérletek szépen [10] igazolták. Legtöbb esetben azonban az erőállandókat „kísérleti” úton határozták meg. Ez azt jelenti, hogy például a diszperziós összefüggések kifejezésében szabadon hagyják a meghatározandó erőállandók értékét, majd mérést végeznek, és az elméleti görbét a kapott kísérleti értékekhez illesztik. Ha ez az illesztés aránylag csekély számú erőállandó megválasztásával lehetséges, az így meghatározott erőállandó-értékeket megbízhatónak tekinthetjük, és velük például termodinamikai stb. mennyiségeket kiszámíthatunk.

Ebben a pontban röviden sorra vesszük azokat a legfontosabb mérési lehetőségeket, melyekkel információkat nyerhetünk a fononokra vonatkozóan, és megvizsgáljuk a ka pott adatok elméleti feldolgozásának lehetőségeit is.

A) Rugalmas hullámok és akusztikus fononok

A $D(\epsilon)$ mátrix vizsgálatakor láttuk, hogy $\mathbf{q} = 0$ -nál 3 sajátértéke 0, a megfelelő három sajátvektor pedig az elemi cella atomjainak (1.25 és 1.61 alapján) azonos kitérését írja le. A szereplő mennyiségek folytonossága miatt a helyzet közelítően megmarad, ha $\mathbf{q} \neq 0$, de $|\mathbf{q}| \ll q_{\max}$. Ezért, minthogy

$$q_{\max} \sim \frac{1}{2} |\mathbf{b}| \sim 10^8 \text{ cm}^{-1},$$

azt remélhetjük, hogy a $\lambda \sim 10^{-2} - 1 \text{ cm}$ hullámhosszúságú rezgések polarizációs vektoraira a fentiek még igazak, másrészt a síkhullám-kifejtésből látható az is, hogy az $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ fázis-szorító igen lassan változik celláról cellára. Gyakorlatilag tehát többeszer, vagy még több elemi cella mint egész együtt végzi a mozgását. Ennek a mozgásnak másik sajátossága, hogy diszperziós relációja lineáris: ha \mathbf{q}_0 -val a \mathbf{q} irányú egységvektort jelöljük,

$$\omega(\alpha, \mathbf{q}) = c(\alpha, \mathbf{q}_0) |\mathbf{q}|, \quad (1.64)$$

ahol egy megadott irányban c állandó. Ezt az összefüggést a $D(\mathbf{q})$ mátrix elemeinek sorfejtése útján a három akusztikus égra könnyű bebizonyítani [2]. A fenti mozgás kvalitatív képe viszont teljesen megegyezik egy rugalmas, anizotróp közeg hangszerű mozgásaival, a lineáris diszperzió a rugalmas hullámok legfontosabb tulajdonsága. Másrészt várható is, hogy az atomi méretekhez képest rendkívül nagy hullámhosszak esetén a fononok által leírt mozgás átmegy abba, amit a rugalmasságtan egyenletei megszabnak. Ez az állítás plauzibilis, azonban részletes igazolása az általános esetben elég hosszadalmas, és az erőállandók több, általunk nem vizsgált szimmetriatulajdonságának felhasználásával történik [2].

A fentiek miatt az $\omega(1, 2, 3; \mathbf{q})$ által jellemzett 3 frekvenciaágat akusztikus ágnak nevezik. Eszerint *kristályban terjedő rugalmas hullám, vagy hosszúhullámú akusztikus fonon ugyanaz a fogalom*. A két elmélet paraméterei, a rugalmas állandók és az erőkonstansok között tehát meghatározott összefüggések teljesülnek, más szóval a hosszúhullámú fononok diszperzióját a rugalmas állandók szabják meg. A kristály szimmetriáival rendelkező anizotróp kontinuum rugalmas állandóinak szémától függően több-kevesebb egyenletet kaphatunk az erőállandók és a rugalmas állandók között, ha a $D(\mathbf{q})$ kis \mathbf{q} -ra érvényes alakját a rugalmasságtan megfelelő

determinánsával összehasonlítjuk [11]. Az így nyert egyenletek általában nem elegendők az erőkonstansok meghatározására, azonban kiváló ellenőrzési lehetőséget szolgáltatnak a más úton nyert erőállandó értékekre. A neutronszórásnál kapott diszperziós görbék így az ultrahanggal végzett mérések segítségével ellenőrizhetők.

B) Optikai abszorpció

Ha az elemi cella több atomot tartalmaz, a 3 előbb vizsgált akusztikus ágon kívül fellépő többi ágat *optikai ágnak* nevezik. Az elnevezés magyarázata a következő: Láttuk, hogy $\mathbf{q}=0$ -nál $\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{q})$ valós. Valós tehát az optikai ág polarizációs vektora is, és mivel merőleges az akusztikus polarizációs vektorra az (1.26) értelemben, tehát a cella *egyes atomjai optikai rezgésnél egymáshoz képest mozdulnak el*. Kis \mathbf{q} esetén a helyzet még hasonló, a cellában levő atomoknak egymáshoz viszonyított celláról cellára lassan változó mértékű elmozdulása olyan, mintha pl. két, különböző fajta atomokból álló, egymásba merített merev rácsot mozgatnánk egymással szemben. Az ilyen típusú mozgás ionkristályokban a cellán belüli dipól-momentum periodikus változását jelenti, és ez *optikai abszorpciót és reflexiót eredményez*. Tapasztalati tény, hogy az $\omega(\text{opt}, \mathbf{q})$ frekvenciák értéke $\lambda \sim 10^{-3}$ cm hullámhosszúságú fény frekvenciájának felel meg, vagyis $\mathbf{q} \sim 0$ közelében az infravörös fény frekvenciája és hullámhossza egyaránt a kristály optikai rezgéseinek adataival egyenlő. Az infravörös fényrel végzett mérésekkel tehát $\omega(\text{opt}, 0)$ értéke megállapítható, és az erőállandókból kiszámított értékkel összevethető. Másrészt bonyolultabb összetételű rácsok esetén, ahol a frekvenciafelületek igen sok ágból állnak, a neutron-szórási kép alapján általában nehéz az egyes ágakat polarizáció szerint osztályozni, és ebben igen sokat segít, ha pl. tudjuk, hogy az illető fonon optikailag aktív.

C) A fononspektrum

A kristály legtöbb termikus tulajdonsága szoros kapcsolatban áll a fononok relatív eloszlását megadó függvénnyel, a fononspektrummal. Ezt a függvényt a következőképpen kapjuk: Jelöljük az $(\omega, \omega + d\omega)$ intervallumba eső fonon-frekvenciák számát $N(\omega)d\omega$ -val, akkor, mivel a frekvenciák száma összesen $3N^3p$, a fononspektrumot a

$$f(\omega) = \frac{1}{3N^3p} N(\omega) \quad (1.65)$$

összefüggés határozza meg. Láthatóan

$$\int_0^\infty f(\omega) d\omega = 1. \quad (1.66)$$

Ezzel a függvénnyel például a T hőmérsékletű kristály belső energiája így fejezhető ki:

$$E(T) = \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q}) \left\{ n[\omega(\alpha, \mathbf{q})] + \frac{1}{2} \right\} = 3N^3p \int_0^\infty \frac{\hbar \omega f(\omega)}{e^{\frac{\hbar \omega}{T}} - 1} d\omega \quad (1.67)$$

figyelembe véve, hogy a $\omega(\alpha, q)$ frekvenciájú gerjesztések száma a statisztikus mechanika szerint***

$$\langle \hat{a}^+ \hat{a} \rangle = n(\omega) = \left(e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1 \right)^{-1}. \quad (1.68)$$

Minthogy a hullámszám-vektorok az 1.19 szerint egyenletesen oszlanak el a Brillouin-zónában, a frekvenciák eloszlását a diszperziós összefüggések egyértelműen meghatározzák. A frekvenciaspektrum jelentése alapján azonnal látható, hogy a q vektorok $\varrho(q)$ sűrűségével kifejezve:

$$f(\omega) d\omega = \frac{1}{3N^3 p} \sum_{\alpha} \int_{\omega(\alpha, q) \leq \omega + d\omega} \varrho(q) dq,$$

vagy felületi integrál formájában, felhasználva a (1.19) összefüggést:

$$f(\omega) = \frac{v_0}{(2\pi)^3} \frac{1}{3p} \sum_{\alpha} \int_{\omega(\alpha, q) = \omega} ds(q) \frac{1}{|\text{grad } \omega(\alpha, q)|} \quad (1.69)$$

és itt az integrálást minden α ágban az $\omega(\alpha, q) = \omega$ felületen kell elvégezni. A fenti definíciók alapján az $f(\omega)$ függvény több általános tulajdonságát előre meg lehet állapítani [12]. Ez a függvény folytonos, deriváltja több pontban szingularitást mutat, és valamely maximális ω_{\max} értéknél $f(\omega)$ 0-vá válik, deriváltja itt $-\infty$. Könnyen bebizonyítható ezenkívül, hogy

$$f(\omega) = \text{konst.} \cdot \omega^2 \quad \text{ha} \quad \omega \ll \omega_{\max}. \quad (1.70)$$

Ez abból következik, hogy egészen kis frekvenciák esetén csak az akusztikus fononfrekvenciák jönnek számításba, és azok közül is a hosszúhullámúak, melyekre az (1.64) diszperziós összefüggés érvényes. Lineáris diszperzió mellett viszont (1.70) az (1.69) egyenlet következménye. Eredményünket az

$$f(\omega) = \frac{3}{\omega_0^3} \cdot \omega^2, \quad \text{ha} \quad \omega \ll \omega_{\max} \quad (1.71)$$

alakba írhatjuk, az így definiált ω_0 állandót az alább említendő okok miatt a *Debye-frekvencia* $T=0$ -nál vett értékének nevezik. — Így például abban az idealizált esetben, amikor az (1.64)-ben fellépő hangsebességek irányfüggetlenek, tehát a kristály teljesen izotróp kontinuumként viselkedik, ω_0 -ra (1.69)-ből a

$$\frac{3}{\omega_0^3} = 4\pi \frac{v_0}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right)$$

összefüggést nyerjük, itt c_t a transzverzális, c_l a longitudinális hanghullámok sebessége. A reális kristályok természetesen nem izotrópok, ω_0 értékét csak közelítő numerikus módszerekkel lehet a rugalmas állandókkal kiszámítani.

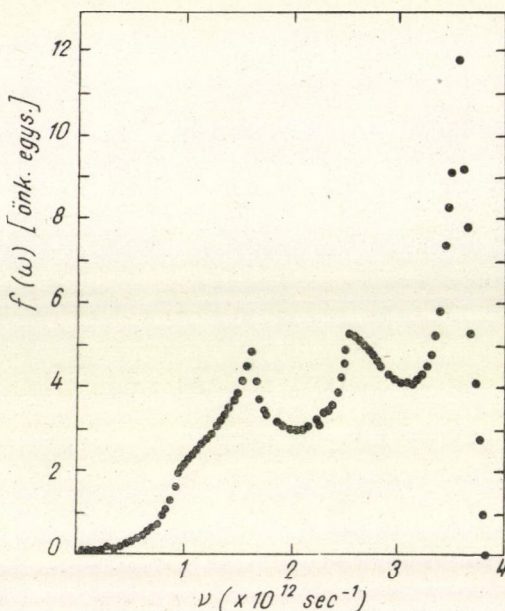
A fononspektrum valamennyi felsorolt tulajdonságát jól szemlélteti a következő ábra, mely a diszperziós összefüggések alapján számított fononspektrumot ábrázolja Na fém esetén:

*** A hőmérsékletet energiaegységekben mérjük, $k_{\text{Boltzmann}} = 1$.

Térjünk vissza egy pillanatra a belső energia (1.67) kifejezéséhez. Világos, hogy ha $T \ll \hbar \omega_{\max}$ akkor az $n(\omega)$ szorzó miatt elég az $\omega \ll \omega_{\max}$ értékekre integrálni, ott viszont az alacsony hőmérsékleten mért fajhő kifejezésében a fononspektrum egyetlen paraméterrel, a rugalmas állandókkal összefüggő ω_0 -val jellemzhető. Ez a hőmérsékleti tartomány 0—néhány K° között van. Kísérleti tapasztalat azonban, hogy a fajhőhöz hasonló, a fonon-spektrumot integrál jele alatt tartalmazó mennyiségek esetén többnyire jó közelítéshez jutunk, az alábbi, ún. *Debye-féle fononspektrum* segítségével

$$f(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{\omega_D^3} \cdot \omega^2 & \omega \leq \omega_D \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases} \quad (1.72)$$

ha itt az ω_D állandót, a *Debye-frekvenciát* alkalmasan választjuk meg. Az itt szereplő Debye-frekvencia már nem valamiféle elmélet eredménye, hanem az illető méréstől, a hőmérséklettől is függő empirikus paraméter. Látszik, hogy ha az integrál alatt $f(\omega)$ mellett szorozóként $n(\omega)$ szerepel, az (1.72) spektrum $T \rightarrow 0$ esetén $\omega_D = \omega_0$ -val a pontos eredményre vezet, egyébként ω_D értékéről semmit sem tudunk. Az a tény, hogy az 1. ábrán láthatótól teljesen eltérő *Debye-spektrum* integrális mennyiségek első becslésére mégis jól használható a legtöbb esetben, a következő okokkal magyarázható:



1. ábra. Na fononspektruma diszperziós összefüggésekből nyert erőállandók alapján [30]

1. a spektrum helyesen tükrözi a spektrum kezdeti szakaszának ω -függését;
2. valamely adott ω_{\max} érték felett eltűnik, épp úgy, mint a valódi spektrum;
3. az integrálás miatt a spektrum valódi alakjára a fajhő és hasonló mennyiségek kevésbé érzékenyek, egyetlen megválasztható paraméter már jó egyezést tehet lehetővé.

Fizikai jelentése tehát csak ω_0 -nak van, a kísérleti értékek a rugalmas adatokkal valóban megegyeznek [13]. Másrészt a különböző módszerekkel magasabb hőmérsékleteken kapott ω_D értékek eltérnek, ami az előbbieket alapján érthető. A fonon-spektrum valódi alakját a már említett okok miatt integrális mennyiségek (fajhő, entrópia, diffrakciós csúcs intenzitása stb.) alapján csak durván reprodukálhatjuk, ezzel szemben a neutronok szórása fononspektrum mérésére kiválóan alkalmas.

D) A neutronszerzési kísérletek analízise

Ki fog derülni, hogy ha a kristályt felépítő magok fizikai tulajdonságai lehetővé teszik a neutronok koherens szórását, ezzel mind a diszperziós összefüggések, mind a polarizációk mérése lehetővé válik az egész Brillouin-zónában. Az optikai kísér-

letekkel ellentétben a neutronok szórásánál nincsenek kiválasztási szabályok, a kristály kémiai tulajdonságai a mérési lehetőségeket csak annyiban érintik, hogy pl. egyes túlságosan nagy frekvenciájú fonon méréseit technikailag igen nehéz biztosítani. Ma már igen sok anyagon végeztek neutronszerelési kísérleteket, (összefoglalva ld. pl. [14]) és ezzel az illető kristály fononjaira vonatkozó összes dinamikai adat birtokába jutottunk. Kérdés, érdemes-e ezek után analízist végezni; kiszámítani például az erőállandókat. Nyilvánvaló, hogy az elmélet alapfeltevéseinek érvényességéről éppen ezen az úton győződhetünk meg. Mikor a kapott adatokból megpróbáljuk meghatározni az erőállandókat, kiderül, hogy milyen hatótávolságúak az ionokat összetartó erők, centrálisak, vagy más természetűek, milyen szerepe van az anharmonikus effektusoknak, mennyire jelentős az elektron-fonon kölcsönhatás stb. Ilyenkor két eset lehetséges. Kiderülhet, hogy a harmonikus, adiabatikus közelítésen alapuló leírás helyes, ekkor a kapott erőállandók segítségével minden további fizikai mennyiséget megbízhatóan kiszámíthatunk. Előfordulhat azonban, hogy amikor az erőállandókat a diszperziós görbék alapján meg akarjuk határozni, ellentmondásokba ütközünk: egyre távolabbi szomszédok hatását figyelembe véve, a közeli szomszédokra kapott erőállandó-értékek teljesen megváltoznak, értéküket tehát egyáltalán nem lehet megbízhatónak tekinteni. Ilyenkor nyilvánvaló, hogy az eddig tárgyalt egyszerű Born—Kármán-féle modell túlságosan primitív, a kérdéses anyag esetén nem alkalmazható.

A különböző anyagokon elvégzett mérések mindkét esetre szolgáltatnak példát. Jónak bizonyult a Born—Kármán-modell például Na-fém esetében, az erőállandókkal számított frekvenciaspektrum [30] a kísérleteket [15] pontosan reprodukálta. Nem konvergáltak az erőállandók a Ge [16], Pb [17] esetén. Mindkét esetben az adiabatikus közelítést kell felülvizsgálni; ólom esetén például valószínű, hogy a fononoknak a vezetési elektronokkal való erős kölcsönhatása, az ún. Kohn-effektus [18] okozza a Born—Kármán-modellől való eltéréseket.

Összefoglalva tehát azt mondhatjuk, hogy az adatok Born—Kármán-féle analízise mindenképpen szükséges, akár azért, hogy a leírás helyességéről meggyőződjünk, akár azért, hogy a további korrekciós lehetőségekről képet kaphassunk.

II. Lassú neutronok szórása kristályon

1. A koherens és inkoherens hatáskeresztmetszet

Ha a termikus reaktorból kilépő lassú ($E_0 \sim 25$ meV) neutronok nyalábja kristályra esik, a neutronok egy része mozgásának irányát és energiáját megváltoztatva szóródik, miközben a kristály kvantumállapotában változás történhet.

Az elektronokkal, röntgensugarakkal végzett szórás-kísérletekhez hasonlóan, itt is a szóródott nyaláb szög és energia szerinti eloszlásából következtetünk a kristály tulajdonságaira. Világos azonban, hogy a szórás kép legfontosabb tulajdonságai nemcsak a kristálytól, hanem a részecskével való kölcsönhatás módjától is függenek. Attól függően, hogy milyen részecskét szórunk, továbbá mekkorák a szereplő energiák és impulzusok, a szórás képben a kristály más-más tulajdonságai kerülnek előtérbe. Ismeretes például, hogy a röntgensugarak szórása segítségével megismerhető a kristály rács szerkezete, de a szokásos röntgendiffrakció az atomi dinamikáról kevés felvilágosítást ad.

Látni fogjuk, hogy a neutronok éppen azért kiváló eszközei a kristályfizikának, mert a kísérleti feltételek megfelelő beállításával elérhetjük, hogy a szórási képben ne csak a periodikus szerkezet hatása jelentkezzen, hanem jól kivehetően látsszanak az atomi mozgás részletei, az egyes fonon-módusok is.

A szórási tárgyalásánál abból indulunk ki, hogy a neutron az elektromágneses erők hatását nem érzi, csak a magokkal lép kölcsönhatásba. (Ez csak közelítően van így, mágneses momentuma révén a neutron a mágneses tér hatására is szóródik, azonban a para- és ferromágneses kristályoktól eltekintve ez a feltevés igen jó közelítést jelent.) Ez a tény — az elektronfelhőkön szóródó fény —, vagy elektronnyalábbal szemben — az atomi dinamika vizsgálatánál igen kedvező.

További előnyt jelent, hogy a lassú, $10^{-1} - 10^{-3}$ eV energiájú neutron szórása magfizikai szempontból igen egyszerűen tárgyalható.

Ugyanúgy, ahogyan szabad mag esetén ilyen kis energiáknál elegendő a szórási leírásához az ún. „szabad szórási hosszak” [19] ismerete, a molekulában, kristályban kötött atommag esetében is csak néhány állandó, a „kötött szórási amplitúdók” képviselik a magerők hatását. Az erre vonatkozó részletes vizsgálatok [20] megmutatták, hogy az átmeneti valószínűséget formálisan az első Born-közelítés ismert képlete szolgáltatja:

$$W(i, i_n \rightarrow f, f_n) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i | \langle i_n | \hat{V} | f_n \rangle | f \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + E_0 - E), \quad (2.1)$$

ahol $|i\rangle$, $|f\rangle$ a kristály kezdeti és végállapotát, E_i , E_f a kristály szórási előtti, illetve utáni energiáját jelöli, $|i_n\rangle$, $|f_n\rangle$ pedig a neutron kezdeti és végállapota, E_0 a beeső és E a szórt neutron energiája. Ebben a formulában azonban a \hat{V} potenciál helyére nem a magerőket képviselő valamiféle valódi potenciált kell írni, hanem a következő, ún. Fermi-féle pszeudopotenciált:

$$\hat{V} = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_v (A_v + 2C'_v \hat{S}_v \cdot \hat{s}) \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_v), \quad (2.2)$$

ahol m a neutron tömege,

\mathbf{r}_n a neutron koordinátája,

\mathbf{r}_v a v -dik mag koordinátája,

\hat{S}_v a v -dik mag spin-operátora,

\hat{s} a neutron spin-operátora,

A_v a v -dik mag ún. koherens szórási amplitúdója, és

$C_v = C'_v \sqrt{I_v(I_v + 1)}$ a v -edik mag inkohérens szórási amplitúdója,

I_v a v -dik mag spinje.

Az összegezésnél a v index a kristály összes atomján végigfut. A hatáskeresztmetszet innen az ismert módon úgy kapható, hogy osztunk a beeső neutronok áramsűrűségével, és szorzunk az egységnyi energiaintervallumba eső neutron-végállapotok számával. — Az így kapott hatáskeresztmetszet azonban a szórt rendszer egy bizonyos kezdeti állapotából adott végállapotba való átmenetére vonatkozik, míg a mérésekből rendszerint nem ezt a mennyiséget lehet meghatározni. A mérés ugyanis legtöbbször abból áll, hogy megmérjük a beeső neutronok $\hbar\mathbf{k}_0$ impulzusát, majd a $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ térszögbe $(E, E + dE)$ energiával szórt részek intenzitását vizsgáljuk. Éppen ezért a mérés során adódó hatáskeresztmetszet mindazon folyamatok hatáskeresztmetszetének *összege* lesz, melyekben a neutron kezdeti

impulzusa, illetve szóródási szöge és végenergiája meghatározott, de pl. a szórt neutron spinje, vagy a kristályt jellemző végállapot-kvantumszámok tetszőleges értékűek.

Ezért a végállapot-kvantumszámokra — kivéve a szórt nyaláb irányát és energiáját — összegezni kell a (2.1)-ből nyert hatáskeresztmetszeteket. Másrészt a neutron $\hbar\mathbf{k}_0$ impulzusán kívül a kezdeti kvantumszámok sem ismertek. Feltételezzük, hogy a kristály a szórási folyamat előtt környezetével hőmérsékleti egyensúlyban volt, tehát

$$W_i(T) = \frac{1}{z} e^{-\frac{E_i}{T}} \quad z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{T}} \quad (2.3)$$

valószínűséggel tartózkodik az $|i\rangle$ kezdeti állapotban. A kezdeti kvantumszámokra ezért a felírt valószínűségekkel *átlagolnunk* kell a hatáskeresztmetszetet. Ha beírjuk a (2.2) potenciált (2.1)-be, hatáskeresztmetszetre térünk át, továbbá a neutron kezdeti és végállapotát $\hbar\mathbf{k}_0$ és $\hbar\mathbf{k}$ impulzusú síkhullámokkal jellemezzük, a következő eredményre jutunk:*

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \sum_{i, \sigma_0} \frac{1}{2} W_i(T) \sum_{f, \sigma} B(i, \sigma_0 \rightarrow f, \sigma) \delta(E_i - E_f - \varepsilon) \quad (2.4)$$

$$B(i, \sigma_0 \rightarrow f, \sigma) = |\langle i | \langle \sigma_0 | \sum_v (A_v + 2C'_v \hat{S}_v \cdot \hat{S}_v) e^{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{r}}_v} | \sigma \rangle | f \rangle|^2,$$

ahol a következő jelöléseket használtuk:

$\frac{d\sigma^2}{d\Omega dE}$ annak a folyamatnak a hatáskeresztmetszete, melynél a $\hbar\mathbf{k}_0$ impulzusú neutron az E körüli egységnyi energia intervallumba és az Ω körüli egységnyi térszögbe szóródik; (a szöveget a \mathbf{k}_0 iránytól számítjuk),

σ_0, σ a neutron kezdeti és végállapotbeli spinjének z -komponense;

$\mathbf{x} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ a neutron impulzus-nyeresége;

$\varepsilon = E - E_0$ a neutron energia-nyeresége a folyamat során.

A felírt hatáskeresztmetszetet kétszer differenciális hatáskeresztmetszetnek nevezik. A formulát tömörebb alakra hozhatjuk [21], ha kihasználjuk a δ függvény

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} dt$$

alakját és feltételezzük, hogy a kristály energia-operátora (1.34) alakú, tehát spin-fügetlen. Egyszerű átalakítással kapjuk, hogy

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} \left\{ \sum_{i, \sigma_0} \frac{1}{2} W_i \langle i | \langle \sigma_0 | \left[\sum_v \hat{X}_v(t) \sum_{\mu} \hat{X}_{\mu}(0) \right] | \sigma_0 \rangle | i \rangle \right\}$$

$$\hat{X}_v(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} [(A_v + 2C'_v \hat{S}_v \cdot \hat{S}_v) e^{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{r}}_v}] e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}, \quad (2.5)$$

ahol egyrészt kihasználtuk, hogy a végállapotok teljes függvényrendszert alkotnak

$$\sum_{f, \sigma} |\sigma\rangle \langle f| \langle f| \langle \sigma| = 1$$

* Itt és a továbbiakban az *exponensben* szereplő \mathbf{x} mindig a \mathbf{x} vektort jelenti.

továbbá az operátorok Heisenberg-képbeli időtől függő alakjára térünk át:

$$e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{X} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = \hat{X}(t). \quad (2.6)$$

Ezzel a végállapotokra vonatkozó összegezés már nem szerepel, csak a kezdeti neutron-spinre és a kristály kezdeti állapotaira kell átlagolnunk. Említettük, hogy feltevésünk szerint a Hamilton-operátor csak a koordinátáktól függ. Ezért a kristály állapota koordináta és spinállapotok szorzatára bontható, és ha a v -dik mag spinjének z -komponense I_{vz} ,

$$|i\rangle = |n\rangle |I_{1z}, \dots, I_{vz}, \dots\rangle$$

$$E_i = E_n$$

és minden $|I_{1z}, \dots, I_{vz}, \dots\rangle$ állapot megvalósulása egyformán valószínű. Ezek alapján a spinek szerinti átlagolás egyszerűen elvégezhető. Ennek során az $A_v C_v$ szorzat együttthatója eltűnik, és a megmaradó kifejezés a következő alakú:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE} = \frac{k}{2\pi\hbar k_0} \int dt e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \left\{ \sum_n p_n \langle n | \sum_v A_v e^{i\mathbf{x}\hat{\mathbf{r}}_v(t)} \sum_\mu A_\mu e^{-i\mathbf{x}\hat{\mathbf{r}}_\mu(0)} | n \rangle + \right. \\ \left. + \sum_n p_n \langle n | \sum_v C_v^2 e^{i\mathbf{x}\hat{\mathbf{r}}_v(t)} e^{-i\mathbf{x}\hat{\mathbf{r}}_v(0)} | n \rangle \right\} \quad (2.7) \end{aligned}$$

és itt az $|n\rangle$ állapot megvalósulási valószínűsége

$$p_n = W_i(T) \prod_v (2I_v + 1).$$

Látjuk, hogy a hatáskeresztmetszet formálisan két tag összegére esett szét: Az első tagban $A_v A_\mu$ ($v \neq \mu$)-tartalmazó „interferencia”-tagok is szerepelnek, annak megfelelően, hogy az egyes magokon való szórás amplitúdói adódnak össze, a hatáskeresztmetszet pedig az amplitúdók összegének abszolút-érték-négyzete. (Lásd: (2.4) képletet). A (2.7) képlet első tagját ezért „koherens szórás hatáskeresztmetszet”-nek hívják, a fény szóródásának elméletében fellépő hasonló kifejezés mintájára:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \langle \sum_v A_v e^{i\mathbf{x}\hat{\mathbf{r}}_v(t)} \sum_\mu A_\mu e^{-i\mathbf{x}\hat{\mathbf{r}}_\mu(0)} \rangle_T, \quad (2.8)$$

ahol bevezettük a hőmérsékleti átlagolásra a

$$\langle \rangle_T = \sum_n p_n \langle n | \langle n | \quad (2.9)$$

jelölést. Megjegyzendő, hogy a neutronok koherens szórása nem kizárólag rugalmas, hiszen $\delta(E_i - E_f - \varepsilon)$ miatt különböző energiájú végállapotok járulékait tartalmazza. A második tagban az egyes magok hatása egyszerűen összegeződik, interferencia nem lép fel. Ez a tag úgy adódott, hogy a $C_v C_\mu$ ($v \neq \mu$) típusú vegyes, interferencia tagok együttthatója a spinállapotok teljes rendezetlensége miatt 0-vá vált. Hasonlóan adódik össze pl. két teljesen független fényforrásból származó fényintenzitás; ott a „fázis” értékének határozatlansága felel meg a spin-térbeli „rendezetlenségnek”,

az amplitúdók helyett az intenzitásokat kell összegezni. Ennek az analógiának az alapján az

$$\frac{d^2\sigma_{\text{inc}}}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \left\langle \sum_{\nu} C_{\nu}^2 e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{\nu}(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{\nu}(0)} \right\rangle_T \quad (2.10)$$

kifejezést „inkoherens szórás hatáskeresztmetszet”-nek nevezik. Amint a levezésből kiderül, ezek a képletek egészen általános érvényűek. Az inkoherens és koherens hatáskeresztmetszetekre vonatkozó formulák egyaránt használhatók a molekulákon, kristályokon, folyadékokon történő szórás leírására, ha a szóró rendszerre tett egyetlen megkötés, a spin-térbeli rendezetlenség feltétele teljesül.

Abban a pillantban azonban, amikor a hatáskeresztmetszet értékét számszerűen meg akarjuk adni, szükségessé válik, hogy a szereplő

$$F'(\mathbf{x}, t) = \left\langle \sum_{\nu} A_{\nu} e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{\nu}(t)} \sum_{\mu} A_{\mu} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{\mu}(0)} \right\rangle_T \quad (2.11)$$

$$F'_s(\mathbf{x}, t) = \left\langle \sum_{\nu} C_{\nu}^2 e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{\nu}(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{\nu}(0)} \right\rangle_T \quad (2.12)$$

hőmérsékleti átlagokat, az ún. *korrelációs függvényeket* az illető szóró rendszer esetén meghatározzuk. Általában persze nem áll rendelkezésünkre a szóró rendszer részletes kvantummechanikai leírása, amely ennek a számításnak az elvégzéséhez szükséges.

Ezért a szórás képet úgy igyekszünk megérteni, hogy valószerűnek látszó modellt alkotunk a szóró rendszerről, közelítően vagy pontosan meghatározzuk a korrelációs függvényeket ennek a modellnek az alapján, és a kísérleteket a számításokkal összevetve megvizsgáljuk, mennyire tükrözi a modell a realitást, milyen irányban kell azt továbbfejleszteni. Ezek alapján világos, hogy a korrelációs függvények kiszámításához molekulák, kristály vagy folyadék esetén más és más módszereket kell igénybe venni.

Azonnal látni fogjuk, hogy a harmonikus, Born—Kármán-képpel leírható kristály esetében a korrelációs függvényt *pontosan* ki tudjuk számítani, és ezzel — a neutron adatait, a \mathbf{x} és ϵ mennyiségeket is célszerűen változtatva — a diszperziós összefüggések és polarizációs vektorok értékét meghatározhatjuk. Most tehát — felhasználva az I. fejezetben nyert ismereteinket — hozzáfogunk a kristály ((2.11), (2.12)) korrelációs függvényeinek kiszámításához. Írjuk először is a ν, μ index helyére a kristály atomjait jellemző (k, \mathbf{l}) index-párt, és végezzük el a

$$\hat{\mathbf{r}}_{\nu} = \mathbf{r}_k^l = \mathbf{l} + \mathbf{r}_k + \hat{\mathbf{u}}_k^l$$

helyettesítést. Felhasználva, hogy \mathbf{l}_1 és \mathbf{r}_k állandók, F' és F'_s -re ez adódik:

$$\begin{aligned} F'(\mathbf{x}t) &= \sum_{k, k'} \sum_{l, l'} A_{kl} A_{k'l'} e^{i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{l}')} e^{i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k'})} \left\langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_{k'}^{l'}(0)} \right\rangle_T \\ F'_s(\mathbf{x}t) &= \sum_k \sum_l C_{kl}^2 \left\langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(0)} \right\rangle_T. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Könnyű belátni, hogy a szereplő

$$\left\langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(0)} \right\rangle_T$$

hőmérsékleti átlag csak a $(\mathbf{l}-\mathbf{l}')$ különbség függvénye, ehhez a fonon-állapotok (1.62) eltolási szimmetriája és \hat{H} invarianciája elegendő. Speciálisan:

$$\langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^l(0)} \rangle_T = \langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^0(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^0(0)} \rangle_T. \quad (2.14)$$

Amennyiben a k -adik helyen minden cellában ugyanolyan mag foglal helyet, a szórási hossz csak k -tól függ:

$$A_{kl} = A_k; \quad C_{kl} = C_k. \quad (2.15)$$

Így tehát az $(\mathbf{l}, \mathbf{l}')$ szerinti összegezés így alakul át:

$$F'(\mathbf{x}, t) = \sum_{k, k'} A_k A_{k'} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k'})} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^{\mathbf{l}-\mathbf{l}'}(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^0(0)} \rangle_T$$

és ugyanígy:

$$F_s(\mathbf{x}, t) = N^3 \sum_k C_k^2 \langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^0(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^0(0)} \rangle_T.$$

Az egy cellára jutó szórási hatáskeresztmetszet kifejezése tehát:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^3} \frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\varepsilon} &= \frac{k}{k_0} [S_{\text{coh}}(\mathbf{x}, \varepsilon) + S_{\text{inc}}(\mathbf{x}, \varepsilon)] \\ S_{\text{coh}}(\mathbf{x}, \varepsilon) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} F(\mathbf{x}, t) dt \\ S_{\text{inc}}(\mathbf{x}, \varepsilon) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} F_1(\mathbf{x}, t) dt \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}, t) &= \sum_{k, k'} A_k A_{k'} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k'})} \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^{\mathbf{l}-\mathbf{l}'}(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k^0(0)} \rangle_T \\ F_s(\mathbf{x}, t) &= \sum_k C_k^2 \langle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k(t)} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{u}}_k(0)} \rangle_T. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Az S_{coh} és S_{inc} mennyiségeket koherens és inkohereus szórásfüggvénynek hívják. Fourier-transzformáltjaik, az $F = \frac{1}{N^3} F'$ korrelációs függvények felírásánál áttértünk az egyszerűbb

$$\hat{\mathbf{u}}_k^0(0) = \hat{\mathbf{u}}_k, \quad \hat{\mathbf{u}}_k^0(t) = \hat{\mathbf{u}}_k(t)$$

jelölésekre.

Tételezzük most fel, hogy a cellák k -ik helyén ugyanazon elemnek esetleg más-más izotópja foglal helyet.

Minthogy a magban levő neutronok száma kémiai kötést, és így az erőkonstansok értékét nem befolyásolja, annak valószínűségét, hogy egy bizonyos cellában az X_1, X_2 , stb. izotópot találjuk, nyilvánvalóan csak az összetétel szabja meg, függetlenül a szomszédos cellákban levő magoktól. Másrészt a szereplő hőmérsékleti átlagérték a kristály (1.34) alakú Hamilton-operátorától függ csupán, melyet az erőállandók és a tömegek egyértelműen meghatároznak. Ha *magasabb rendszámú* elem különböző tömegű izotópjairól van szó, a Hamilton-operátorban nemcsak az erőállandók maradnak változatlanok, de a tömegeknek ezt a viszonylag kis megváltozását is elhanyagolhatjuk, ezáltal a (1.62) translációs invarianciát kife-

jező képlet érvényes marad. Ugyanakkor azonban a különböző izotópok, magfizikai tulajdonságai, tehát *magspinje, szórási hossza* lényegesen eltérnek egymástól. Könnyen beláthatjuk, hogy (2.15) helyett most a

$$A_{kl} A_{k'l'} \rightarrow \bar{A}_k \cdot \bar{A}_{k'} + [\bar{A}_k^2 - (\bar{A}_k)^2] \delta_{k,k'} \delta_{l,l'}$$

$$C_k^2 \rightarrow \bar{C}_k^2$$

helyettesítést kell végeznünk, ahol a felülvonás az izotóp-összetétel szerinti átlagképzést jelenti. A (2.16) és (2.17) képletek továbbra is érvényesek maradnak, ha a

$$A_k A_{k'} \rightarrow \bar{A}_k \cdot \bar{A}_{k'} \quad \text{és} \quad C_k^2 \rightarrow \bar{C}_k^2 + \delta_{k,k'} [\bar{A}_k^2 - (\bar{A}_k)^2] \quad (2.18)$$

helyettesítéseket elvégezzük. Látható, hogy az izotópok szerinti rendezetlenség ismét inkoherens szórást eredményez, éppúgy, mint ahogyan a spinek esetén történt.

A továbbiakban egyszerűen a (2.16), (2.17) képleteket használjuk, de a szórási hosszaknak különböző izotópok jelenlétekor a (2.18) jelentést tulajdonítjuk. Térjünk most rá a

$$\Gamma_{kk'}^{(l)}(t) = \langle e^{i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)} e^{-i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'}} \rangle_T$$

átlagérték kiszámítására [22], annak alapján, hogy a Hamilton-operátor az (1.34) fonon-energiaoperátor, sajátállapotai fonon-szám sajátállapotok, az $\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)$ kitérésre pedig az (1.61) kifejtés érvényes. A kitevőben tehát abszorpciós és emissziós operátorok lineáris alakja szerepel, így az algebrai úton igazolható Wick-tétel [6] szerint:

$$e^{i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)} e^{-i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'}} = e^{i\mathbf{x}(\hat{\mathbf{u}}_k^l(t) - \hat{\mathbf{u}}_{k'})} e^{\frac{1}{2}[\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t), -i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'}]}.$$

Újabb egyszerű algebrai átalakítás után kapjuk az elnyelő és keltő operátorok fenti átlagértékére vonatkozó, ún. Bloch-féle tételt [21]:

$$\langle e^{i\mathbf{x}(\hat{\mathbf{u}}_k^l(t) - \hat{\mathbf{u}}_{k'})} \rangle_T = e^{\frac{1}{2}\langle (i\mathbf{x}(\hat{\mathbf{u}}_k^l(t) - \hat{\mathbf{u}}_{k'}))^2 \rangle_T},$$

tehát az összeget tagonként átlagolva ezt kapjuk:

$$\Gamma_{kk'}^l(t) = e^{-\frac{1}{2}\langle [i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)]^2 \rangle_T + \langle (i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'})^2 \rangle_T} e^{\langle [i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)][i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'}] \rangle_T}.$$

Nyilvánvaló, de az (1.61) kifejezés azonnal mutatja is, hogy a $\langle [i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)]^2 \rangle_T$ átlag sem l -től, sem t -től nem függ, ezért

$$\Gamma_{kk'}^l(t) = e^{-\frac{1}{2}\langle (i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l)^2 \rangle_T + \langle (i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'})^2 \rangle_T} e^{\langle [i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_k^l(t)][i\mathbf{x}\hat{\mathbf{u}}_{k'}] \rangle_T},$$

vagy a

$$\langle \hat{\mathbf{u}}_{k,x}^l(t) \hat{\mathbf{u}}_{k',x'} \rangle_T = \mathbf{M}_{kk'}^l(t)|_{xx'} \quad (2.19)$$

jelöléssel**

$$\Gamma_{kk'}^l(t) = e^{-\frac{1}{2}\langle \mathbf{x}\mathbf{M}_{kk}^l - \mathbf{x}\mathbf{M}_{k',k'}^l \rangle} e^{\mathbf{x}\mathbf{M}_{kk'}^l(t)\mathbf{x}}. \quad (2.20)$$

A $\mathbf{x}\mathbf{M}\mathbf{x}$ kifejezést, mely, mint látjuk, az elemi cellában levő k -ik mag \mathbf{x} irányú kitérése négyzetének átlaga, így jelölük:

$$\mathbf{x}\mathbf{M}_{kk}\mathbf{x} = 2W_k$$

** A \mathbf{M} tenzoroknál a $t=0$, $l=0$ argumentumot nem jelöljük.

és a $\exp(-2W_k)$ kifejezést Debye—Waller-faktornak hívják. Ez a szorzó szabályozza a röntgen-difrakciós csúcsok intenzitását, és a neutron-szórásnál mint kiderül, teljesen hasonló szerepe van. Végeredményül tehát azt írhatjuk, hogy az egy elemi cellára jutó hatáskeresztmetszet ilyen alakú lesz:

$$\frac{1}{N^3} \frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \sum_{kk'} A_k A_{k'} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k'})} e^{-W_k - W_{k'}} \frac{1}{N^3} \sum e^{i\mathbf{x}(1-\mathbf{l}')} \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}t} e^{i\mathbf{M}_{kk'}^l(t)\mathbf{x}} dt \quad (2.21)$$

$$\frac{1}{N^3} \frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}}{d\Omega dt} = \frac{k}{k_0} \sum C_k^2 e^{-2W_k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}t} e^{i\mathbf{M}_{kk}^l(t)\mathbf{x}} dt. \quad (2.22)$$

2. A fonon-sor

Azonnal látni fogjuk, hogy az $\mathbf{M}_{kk}^l(t)$ tenzor a fekvenciák és polarizációs vektorok függvényeként könnyen megadható, és ezáltal a hatáskeresztmetszet Fourier-transzformáltja, a korrelációs függvény zárt alakban előtűnik áll. A szórásfüggvényre vezető Fourier-transzformáció azonban csak sorfejtés alkalmazásával végezhető el, és áttekinthető eredményt csak az alábbi két esetben kapunk:

1. Ha \mathbf{x} „elég kicsi”. Ekkor a hatáskeresztmetszetet előállító végtelen sor első tagjai mellett a többi tag elhagyható.

2. Ha \mathbf{x} „nagy”, a végtelen sort közelítően összegezni tudjuk. Az idézőjelbe tett kifejezés értelme később válik érthetővé, egyelőre fogadjuk el, hogy „valamihez képest” kicsiny, vagy egészen nagy \mathbf{x} értékek mellett jó közelítések léteznek (2.21) és (2.22) kiszámítására.

Ahhoz, hogy a közelítő módszerekhez eljussunk, részletesebben meg kell vizsgálnunk az $\mathbf{M}_{kk}^l(t)$ tenzorokat. A (2.19) definíció alapján ez semmi nehézséget nem jelent, ha felhasználjuk a kitérések (1.16) keltő és eltüntető operátorok szerinti kifejtését. A keletkező operátorszorzatok közül csak az $\hat{a}_{\alpha q}^+ \hat{a}_{\alpha q}$ és $\hat{a}_{\alpha q} \hat{a}_{\alpha q}^+$ típusúak átlagértéke nem 0, ezek átlagát viszont (1.56) és (1.68) alapján ismerjük. (1.61), (1.56), és (1.68) felhasználásával végülis azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{M}_{k,k'}^l(t) = \frac{\hbar}{2N^3} \frac{1}{\sqrt{M_k M_{k'}}} \sum_{\alpha q} \frac{e_{k,x}(\alpha, \mathbf{q}) e_{k',x'}^*(\alpha, \mathbf{q})}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \cdot e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{l}} \{n(\omega) e^{i\omega(\alpha, \mathbf{q})t} + [n(\omega) + 1] e^{-i\omega(\alpha, \mathbf{q})t}\}. \quad (2.23)$$

Nézzük először az $\mathbf{l}=0$ esetet, köbös szimmetriájú Bravais-rácsra szorítkozva. A k index ilyenkor elmarad, a polarizációs vektorok valóságok, tehát

$$M_{x,x'}(t) = \frac{\hbar}{2MN^3} \sum_{\alpha, q} \frac{e(\alpha, \mathbf{q})_x \cdot e(\alpha, \mathbf{q})_{x'}}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \{n(\omega) e^{i\omega(\alpha, \mathbf{q})t} + [n(\omega) + 1] e^{-i\omega(\alpha, \mathbf{q})t}\} \quad (2.24)$$

Ez a tenzor határozza meg az inkoherens szórási hatáskeresztmetszetet. Minthogy a kristály köbös szimmetriájú, ez a hatáskeresztmetszet ugyanakkora marad, ha \mathbf{k}_0 és \mathbf{k} vektorok irányát úgy változtatjuk meg, hogy mindkettőt pl. a kristály XY szimmetriasíkjára tükrözzük. A kristály egyensúlyi alakzata erre a tükrözésre önmagába megy át, a két szórási folyamat ezért mindenben egymás tükörképe kell,

hogy legyen. \mathbf{k}_0 és \mathbf{k} tükrözésekor $\boldsymbol{\kappa}$ is megváltozik, a $\kappa'_x = \kappa_x$; $\kappa'_y = \kappa_y$; $\kappa'_z = -\kappa_z$ új értékeket veszi fel. A (2.24) kifejezés azonban nem változhat, speciálisan, ha

$$\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_x, 0, \kappa_z),$$

akkor ez arra vezet, hogy

$$2M_{xz}(t)\kappa_x\kappa_z = -2M_{xz}(t)\kappa_x\kappa_z.$$

Hasonlóan belátható, hogy

$$M_{xx}(t) = M_{yy}(t) = M_{zz}(t); \quad M_{xy}(t) = M_{xz}(t) = M_{yz}(t) = 0.$$

Másfelől, a $(M_{xx} + M_{yy} + M_{zz})$ kifejezésben megjelenik a polarizációs vektor négyzete, ami a normálási feltétel alapján 1, tehát köbös Bravais-rácsra

$$M_{x,x'}(t) = \delta_{x,x'} \frac{\hbar}{2MN^3} \frac{1}{3} \sum_{\alpha\mathbf{q}} \frac{1}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \{n(\omega) e^{i\omega(\alpha, \mathbf{q})t} + [n(\omega) + 1] e^{-i\omega(\alpha, \mathbf{q})t}\},$$

illetve a frekvencia-spektrum segítségével

$$M_{x,x'}(t) = \delta_{x,x'} \frac{\hbar}{2M} \int \frac{f(\omega)}{\omega} \{n(\omega) e^{i\omega t} + [n(\omega) + 1] e^{-i\omega t}\} d\omega \quad (2.25)$$

adódik.

(Megjegyezzük, hogy (2.24)-től (2.25)-höz a szórási kép invarianciájának felhasználása nélkül, pusztán a (1.32), (1.33) összefüggések alapján is eljuthatunk.) Fejtsük sorba ezután a (2.22) kifejezés integrandusát. Az áttekinthetőség kedvéért Bravais-rácsnál maradv

$$e^{\boldsymbol{\kappa}\mathbf{M}(t)\boldsymbol{\kappa}} = 1 + \frac{1}{1!} \boldsymbol{\kappa}\mathbf{M}(t)\boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2!} (\boldsymbol{\kappa}\mathbf{M}(t)\boldsymbol{\kappa})^2 + \dots$$

A t szerinti integrálást tagonként elvégezve azt kapjuk, hogy

$$\frac{1}{N^3} \frac{d^2\sigma_{\text{inc}}}{d\Omega dE} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^2\sigma_{\text{inc}}^{(n)}}{d\Omega dE}, \quad (2.26)$$

ahol az ún. n -fononos (inkohereus) szórási hatáskeresztmetszet:*

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{\text{inc}}^{(n)}}{d\Omega dE} &= C^2 \frac{k}{k_0} e^{-2W} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar}{2M} \right)^n \sum_{+-} \frac{1}{N^{3n}} \sum_{\alpha_1 \mathbf{q}_1} \dots \sum_{\alpha_n \mathbf{q}_n} \cdot \\ &\cdot f_{\alpha_1 \mathbf{q}_1}^{\pm} \dots f_{\alpha_n \mathbf{q}_n}^{\pm} \delta(\varepsilon \pm \hbar\omega(\alpha_1 \mathbf{q}_1) \pm \dots \pm \hbar\omega(\alpha_n \mathbf{q}_n)) \\ f_{\alpha\mathbf{q}}^{\pm} &= \frac{(\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{q})\boldsymbol{\kappa})^2}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \left[n(\omega) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]. \end{aligned} \quad (2.27)$$

* A \sum_{+-} azt jelenti, hogy az előjelek minden, összesen 2^n db variációjára összegezni kell.

Köbös szimmetria esetén ez a (2.25) képlet alapján a

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}^{(n)}}{d\Omega dE} = C^2 \frac{k}{k_0} e^{-2w} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar \kappa^2}{2M} \right)^n \sum_{\pm} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} \frac{f(\omega_1)}{\omega_1} \left[n(\omega_1) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \dots$$

$$\dots \frac{f(\omega_n)}{\omega_n} \left[n(\omega_n) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\varepsilon \pm \hbar\omega \dots \pm \hbar\omega_n) \cdot d\omega_1 \dots d\omega_n \quad (2.28)$$

alakra hozható, a polarizációs vektorok ilyenkor kiesnek a számításból. A (2.27) képletnek egyszerű szemléletes tartalma van: a

$$\delta[\varepsilon + \hbar\omega(\alpha_1 q_1) \dots - \hbar\omega(\alpha_n q_n)]$$

kifejezés arra utal, hogy a $(\alpha_1 q_1)$ adatokkal rendelkező fonon keletkezik, a $(\alpha_n q_n)$ fonon elnyelődik a szóráskor, hiszen az egyik csökkenti, a másik növeli a neutron energia-nyereségét. Az n -fononos szórási hatáskeresztmetszet tehát mindazon folyamatok hatáskeresztmetszetének összege, melyekben n fonon vesz részt, minden lehetséges módon elnyelődve, és keletkezve. Látható, hogy a (α, q) fonon elnyeléskor a $f_{\alpha, q}^-$ keltésekor a $f_{\alpha, q}^+$ szorzó jelenik meg. A helyzet lényegében változatlan, tetszőlegesen bonyolult kristály esetében is, mivel mindig $e^{\pm i\omega t}$ a faktorok szabják meg a M tenzorok időfüggését. A koherens hatáskeresztmetszet hasonló sor alakjában állítható elő, ott azonban — mint látni fogjuk — az egyes tagok által leírt folyamatokban az energia mellett a kváziimpulzus megmaradását biztosító δ függvények is szerepelnek.* Maradjunk most az inkohereus hatáskeresztmetszet sorfejtésénél, és vizsgáljuk meg részletesebben az egyes tagokat.

Az áttekinthetőség kedvéért a köbös szimmetria esetével foglalkozunk. Mindenek előtt a

$$G_1(\hbar\omega) = \frac{1}{\hbar\omega} f(|\omega|) \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} \quad (2.29a)$$

függvény bevezetésével eltüntethetjük a (2.28)-ban az előjelek különböző értékeire való összegezést, ha $-\infty$ -tól $+\infty$ -ig integrálunk:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}^{(n)}}{d\Omega dE} = C^2 \frac{k}{k_0} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} \cdot d\omega_n G_1(\hbar\omega) \dots G_n(\hbar\omega) \delta(\varepsilon - \hbar\omega_1 - \dots - \hbar\omega_n). \quad (2.29b)$$

Más szóval az n -fononos hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}^{(n)}}{d\Omega dE} = C^2 \frac{k}{k_0} e^{-2w} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} \right)^n G_n(\varepsilon) \quad (2.30)$$

* Inkohereus szórásnál a kváziimpulzus nem marad meg. Ez azért van így, mert az inkohereus szórás a spin-operátoroknál kapcsolatos és azok átlagai nem mutatják a fonon-állapotok translációs szimmetriáját.

és itt $G_n(\varepsilon)$ a $G_1(\hbar\omega)$ függvény önmagával vett n -szeres konvolúciója, amit így is írhatunk:

$$G_n(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{n-1}(\varepsilon - \varepsilon') G_1(\varepsilon') d\varepsilon'.$$

Minthogy $\omega \rightarrow 0$ esetén $f(\omega) \sim \omega^2$; tehát $G_1(\hbar\omega)$ és ezzel a $G_n(\varepsilon)$ is sima, folytonos függvény. Ennek a ténynek rendkívül fontos következményei vannak. A hatáskeresztmetszet

$$\frac{1}{N^3} \frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}}{d\Omega dE} = C^2 \frac{k}{k_0} e^{-2W} \left\{ \delta(\varepsilon) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} \right)^n G_n(\varepsilon) \right\} \quad (2.31)$$

alakjából látszik, hogy ha $\varepsilon \neq 0$, nincs értelme pontosan ε energiacserevel szóródó neutronokról beszélni, minthogy az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ intervallumban szóródó neutronok száma $d\varepsilon$ -vel arányos a G_n függvény folytonossága miatt. Más a helyzet $\varepsilon = 0$ -nál. E körül a pont körül akármennyire szűkítjük a mérés intervallumát (más szóval a berendezés csatornaszélességét), akármilyen kicsiny $\Delta\varepsilon$ intervallumban mérünk, a mért hatáskeresztmetszet egyik része, a 0-fononos szórás járuléka $C^2 e^{-2W}$ lesz, függetlenül a mérési intervallum szélességétől. A többfononos folyamatok is vezetnek persze $\varepsilon = 0$ szóráshoz, a rugalmas szórásnak ez a része azonban:

$$C^2 e^{-2W} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} \right)^n G_n(0) \Delta\varepsilon$$

éppúgy arányos az intervallum hosszával, mint a rugalmatlan esetben. Látható tehát, hogy a beeső neutronok véges hányada egzaktul rugalmasan szóródik a kristályon. Világos az is, hogy mikor a mérésből a hatáskeresztmetszetet meghatározzuk, az $\varepsilon = 0$ helyen annál inkább mutatkozni fog a δ szingularitás, minél jobb a berendezés felbontóképessége. Más szóval a kétszer differenciális hatáskeresztmetszet mérésekor a 0 helyen a berendezés felbontóképességének növekedésével egy keskenyedő és egyre jobban kiemelkedő rugalmas csúcs mutatkozik, melynek területe véges marad. Ezt a csúcst a többfononos szórás „hátttere” veszi körül, és a rugalmas szórás többfononos eredetű, nem szinguláris járuléka éppen ennek a háttérnek a folytatása az $\varepsilon = 0$ pontban. A mérésakor adódó rugalmas csúcs alakját és területét befolyásolja a berendezés felbontóképessége is. Fentiekből azonban kitűnik, hogy a mérési intervallum hosszának és a rugalmas csúcs maximumának a szorzata egyre pontosabban közelíti a $C^2 e^{-2W}$ értéket. (A felbontóképesség szerepét később még megvizsgáljuk.)

Látjuk tehát, hogy rugalmatlan szórásnál a kétszer differenciális hatáskeresztmetszet rendelkezik fizikai tartalommal. A rugalmas szórásnál ezzel szemben a 0-fononos csúcs területét megszábo Debye—Waller faktor, vagyis csupán szög szerint differenciális hatáskeresztmetszetet ad a mérőberendezéstől független, jellemző mennyiséget.

Megemlítjük még, hogy ha rögzített κ mellett a $c^2 \cdot k/k_0$ szorzót elhagyva ε szerint integráljuk a (2.31) kifejezés zárójelben levő tagját, mely voltaképpen

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} dt \langle e^{i\kappa\hat{u}(t)} e^{-i\kappa\hat{u}} \rangle_T$$

a megjelenő $\delta(t)$ függvény miatt 1 adódik. Innen látható, hogy rögzített \mathbf{x} mellett a rugalmas csúcshoz és az összes rugalmatlan folyamat integráljának, tehát a többfononos háttér területének az aránya:

$$e^{-2W} : (1 - e^{-2W}). \quad (2.32)$$

Minél közelebb van tehát a Debye—Waller faktor 1-hez, annál elhanyagolhatóbbá válik a többfononos folyamatok háttére a rugalmas csúcs mellett. A Debye—Waller faktort később részletesebben megvizsgáljuk, most előbb vázoljuk, miért jelenik meg a rugalmas csúcsra vezető δ -függvény. Minthogy

$$e^{-2W} = e^{-\frac{1}{2} \langle (\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{u}}(t))^2 + (\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{u}})^2 \rangle_T},$$

ezért abból, hogy a $\mathbf{M}(t)$ tenzor $t \rightarrow \infty$ esetén 0-hoz tart (amint ez a (2.25) előállítás alapján belátható), világos, hogy

$$e^{-2W} = \lim_{t \rightarrow \infty} F(\mathbf{x}, t).$$

Azt látjuk, hogy $F(\mathbf{x}, t)$ a $t \rightarrow \infty$ esetén állandó értékhez tart, tehát Fourier-transzformáltja szükségképpen deltaszerű szingularitást tartalmaz a $\varepsilon=0$ helyen.

Ez az eredmény tetszőlegesen bonyolult kristály esetén igaz marad, sőt akkor is, ha a kristály anharmonikus, vagy hibahelyeket tartalmaz.

Ennél többet is mondhatunk. Elég általánosan be lehet látni, hogy a δ -függvény minden olyan esetben fellép az inkohereus szórásnál, mikor a szóró magok mozgása a térben korlátozott, tehát ha $\langle [\hat{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(0)]^2 \rangle$ nem növekedhet korlátlanul $t \rightarrow \infty$ esetén [23].

Ugyanilyen eredetű a visszalökődés nélküli γ foton elnyelése és kibocsátása a kristályba épült mag radioaktív bomlásakor, sőt, az effektus valószínűségét is éppen az e^{-2W} kifejezés szolgáltatja. [34].

Mielőtt tovább mennénk, megjegyezzük, hogy az „ n -fononos szórás” kifejezés nem egészen pontos. A 2.27 képlet ugyanis világosan mutatja, hogy pl. a két fononos folyamatok közül azok, melyekben egy és ugyanaz a fonon keletkezik és nyelődik el, csak formálisan kétfononos, fizikailag 0-fononos folyamat. Ugyanígy a többfononos hatáskeresztmetszetekben is vannak fizikailag alacsonyabb fonont tartalmazó folyamatok is. Nem nehéz ugyanakkor belátni, hogy ideális kristálynál, ahol az egyes frekvenciák járuléka $\frac{1}{N^3} |e(\mathbf{x}q)|^2$ -nel arányos, ezek a folyamatok elhanyagol-

hatók, és a fizikailag, ill. névlegesen n -fononos folyamatok ugyanazt jelentik.

Nem így áll a helyzet akkor, ha a kristályba „idegen” magok is beépültek. Ekkor is lehet harmonikus közelítésben fononokról beszélni, azonban ha az idegen magokon való neutron szórást vizsgáljuk, meg kell különböztetnünk a formálisan, vagy fizikailag egy vagy több fonont tartalmazó folyamatokat [24].

Térjünk most rá a fonon-sor további tagjainak vizsgálatára. Ha összehasonlítjuk egy fonon elnyelésének és keletkezésének hatáskeresztmetszetét, azt találjuk, hogy a kettő megegyezik, azzal a különbséggel, hogy a keletkezés valószínűsége $(n(\omega) + 1)$ -el, az elnyelése $n(\omega)$ -val arányos, vagyis

$$\frac{W(\text{elnyelés})}{W(\text{keletkezés})} = e^{-\frac{\hbar\omega(\mathbf{x}, \mathbf{q})}{T}}.$$

A neutron-fonon kölcsönhatás ebben a tekintetben erősen emlékeztet az atomoknak sugárzási térrel való kölcsönhatására; a fényelnyelés és fénykibocsátás valószínűségének viszonya ugyanis éppen a fenti kifejezés, csak ω a kérdéses foton frekvenciáját jelenti.

Láthatóan, ha a hőmérséklet 0 felé tart (vagyis $\frac{\hbar\omega}{T} \rightarrow \infty$), akkor $n(\omega)$ az 1 melletti elhanyagolhatóvá válik, és a neutron szórása csak fonon keltésére vezethető: a kristályban elfogytak a fononok, de fonon keltése lehetséges a neutron energiájának rovására.

Ugyanígy jut túlsúlyba az elektromágneses tér intenzitásának csökkentésekor a fényemisszió az elnyeléssel szemben, és elég alacsony hőmérsékleten csak az ún. spontán fényemisszió jön létre. Magasabb hőmérsékleten az elnyelés és kibocsátás valószínűségei egyenlővé válnak, mivel $\frac{n(\omega)+1}{n(\omega)} \approx 1$. A sugárzási térrel fennálló analógia persze nem véletlen, mindkét esetben a Born-közelítés és a részecskékre vonatkozó Bose—Einstein statisztika következménye. Kérdés azonban, hogy az adott kristály esetén valamely T , κ és ε mellett mennyi tagot kell a fonon sorban tekintetbe venni ahhoz, hogy már jó közelítést kapjunk.

Ennek vizsgálata céljából jellemezzük ismét Debye-frekvenciával a fononspektrumot*. Ekkor (2.31) alapján meg lehet mutatni, hogy $\hbar\omega_D$ -hoz képest alacsony hőmérsékleten a sor $\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M\omega_D}$ növekvő hatványai szerint halad, míg magasabb hőmérséklet mellett $T/\hbar\omega_D$ bizonyos hatványai is fellépnek. Innen azt a következtetést lehet levonni, hogy minél inkább teljesülnek a

$$\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M} \ll \omega_D; \quad T \ll \hbar\omega_D \quad (2.33)$$

feltételek, annál jobb közelítés a fonon-sor első tagjára szorítkozni. A Debye—Waller faktor vizsgálatakor ki fog derülni, hogy éppen ilyen feltételek mellett lesz $e^{-2W} \approx 1$. A fonon-sor első tagja, a rugalmas csúcs tehát ilyenkor egyre inkább dominál, ami a fenti eredménnyel jól egybevág.

Ez a tény nem a tett egyszerűsítő feltevések következménye, hanem a szórási hatáskeresztmetszet általános, itt nem tárgyalt tulajdonságaiból következik. Be lehet ugyanis bizonyítani [25], hogy a legnagyobb súllyal azok a folyamatok jönnek létre szórás során, amelyeknél a neutron energia-vesztése éppen $\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M}$, és az egyáltalán létrejövő szórási folyamatok energiája ettől annál inkább különbözhet, minél magasabb a rendszer hőmérséklete. Világos tehát, hogy a (2.33) feltételek közül az első a legvalószínűbb folyamatként a rugalmashoz közelálló, kevés fononos folyamatokat jelöli ki, míg a második feltétel „leszűkíti” erre a tartományra a többi számításba jövő folyamatokat.

A (2.33) feltételek, amelyek a 0, 1 esetleg kétfononos folyamatokra redukálják a szórást, egyben a Mössbauer-effektus létrejöttének kedvező feltételeként is ismerek-

* Ez különösen összetett rácsnál igen durva közelítés, azonban a fonon-sor konvergenciájára vonatkozó kvalitatív becslésnél elfogadható.

tesek. Az elmélet a másik szélső esetben, a

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} \gg \hbar \omega_D \quad T > \hbar \omega_D$$

feltételek esetén a következő eredményt adja: nagy visszalökődési energia mellett a fonon-sor igen *lassan* konvergál. Ehelyett azonban közelítőleg meg lehet a sor összegét határozni, és az adódik, hogy a szórási kép egyre inkább hasonlóná válik a *szabad magon* való szóráshoz, és ha a hőmérséklet is elegendően magas ([22], [35]), a szórási képben semmi sem emlékeztet arra, hogy a szóró mag egy kristály alkotórésze.**

Gyakran fontos lehet, hogy a hatáskeresztmetszetet ilyen feltételek mellett is ki tudjuk számolni, azonban a fononok jellemző tulajdonságainak vizsgálatánál ettől az esettől eltekinthetünk. A továbbiakban tehát a (2.33) feltételeket érvényesnek tekintjük, a fonon-sor első tagjával foglalkozunk.

3. Koherens szórási. Diffrakció és diszperziós összefüggések

A (2.21) képlet fonon-sora így alakul:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}^{(0)}}{d\Omega d\varepsilon} + \frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} + \dots$$

Vizsgáljuk először is az első tagot, amely a 0-fononos szóráshoz vonatkozik:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}^{(0)}}{d\Omega d\varepsilon} = \delta(\varepsilon) \sum_{k, k'} A_k A_{k'} e^{i\kappa(r_k - r_{k'}) - W_k - W_{k'}} \frac{1}{N^3} \sum_{l, l'} e^{i\kappa(l - l')}.$$

Ugyanezt így is írhatjuk:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}^{(0)}}{d\Omega d\varepsilon} = \delta(\varepsilon) \left| \sum_k A_k e^{i\kappa r_k} e^{-W_k} \right|^2 \frac{1}{N^3} \left| \sum_l e^{i\kappa l} \right|^2. \quad (2.34)$$

Itt a

$$|F(\kappa)|^2 = \left| \sum_k A_k e^{i\kappa r_k} e^{-W_k} \right|^2 \quad (2.35)$$

kifejezést, mely az elemi cellákban levő magok elhelyezkedésétől, a szórási hosszaktól és a Debye—Waller faktoroktól függ, *struktúra-faktornak* nevezik. Nyilvánvaló, hogy Bravais-rácsra egyszerűen

$$|F(\kappa)|^2 = A^2 e^{-2W}.$$

A periodikus szerkezet a translációs bázisvektorok többszöröseiből felépülő

$$D(\kappa) = \frac{1}{N^3} \left| \sum_l e^{i\kappa l} \right|^2$$

ún. *forma-faktorban* jut kifejezésre.

Ennek kiszámításához írjuk fel a κ vektort a reciprokrács alapvektoraival kifejezve:

$$\kappa = \kappa_1 \mathbf{b}_1 + \kappa_2 \mathbf{b}_2 + \kappa_3 \mathbf{b}_3. \quad (2.36)$$

** A rugalmas csúcs ugyan megvan, integrális intenzitása azonban $2W \gg 1$ miatt rendkívül kicsiny.

Ezzel — felhasználva az (1.10) összefüggést —, továbbá a fellépő $\exp(2\pi i \kappa_i)$ hányadosú geometriai sor összegképletét és az abszolút értéket képezve — a következő eredményt kapjuk:

$$D(\boldsymbol{\kappa}) = \prod_{i=1}^3 \left(\frac{1}{N} \frac{\sin^2 \kappa_i \pi N}{\sin^2 \kappa_i \pi} \right). \quad (2.37)$$

Ez a kifejezés a fényelhajlás elméletében is szerepel. Látható, hogy ha $\kappa_i = \text{egész}$, akkor a függvény az N^3 maximális értéket veszi fel, a $\kappa_i = \text{egész} + \frac{1}{N}$ értéknél 0-ra csökken és további maximumai az első mellett nem lényegesek. Ez a (2.36) kifejtés alapján azt jelenti, hogy a

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots \quad (2.38)$$

értékeknél N növekedésével egyre kisebb szélességű és egyre növekvő intenzitású csúcsok jelennek meg, másutt az intenzitás elhanyagolhatóan kicsi. Látjuk, hogy ez éppen a röntgendiffrakció elméletéből ismert *Laue—Bragg feltétel*. A 0-fononos koherens neutronszórásért ezért *neutron-diffrakciónak* nevezik, és ennek feltétele tehát, éppúgy, mint a fény esetében, az, hogy a szórásnál létrejövő impulzusváltozás valamely reciprokrácsvektorral legyen egyenlő. Ezen végeredményben nem is csodálkozhatunk, hiszen mindkét esetben síkhullámok periodikus strukturán történő rugalmas szóródásáról van szó, és ennek általános feltétele a (2.38) összefüggés.

Megjegyezzük, hogy a $D(\mathbf{x})$ függvény δ -függvények összegeként állítható elő, pontosabban

$$\lim_{N \rightarrow \infty} D(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{g}) = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \Delta(\boldsymbol{\kappa}) \quad (2.39)$$

amint ez (2.37)-ből elemi átalakításokkal belátható; itt v_0 az elemi cella térfogata.

A diffrakciós csúcsok intenzitását a δ -függvényeknek a mérési módszertől függően történő integrálásával kapjuk. A neutronok koherens szórása tehát éppúgy alkalmas a rács szerkezetének tanulmányozására, mint a röntgendiffrakció: a szórás-kísérletnél az éles Bragg-reflexiók mérésével a reciprokrács vektorokhoz jutunk, és ez ekvivalens az $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ vektorok ismeretével. Ami az egyes magoknak a cellán belüli helyzetét illeti, látjuk, hogy a struktúra-faktorban éppen az \mathbf{r}_k vektorok szerepelnek. A diffrakciós csúcsok intenzitásának mérésével, viszont — mint a képlet mutatja — voltaképpen a struktúra-faktort mérjük, így az \mathbf{r}_k vektorok is meghatározhatók.

Nézzük most meg, mely esetekben előnyösebb a neutrontdiffrakciós módszer a szerkezetkutatásban. Általában az a helyzet, hogy a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat pontosabb. Ugyanakkor azonban sok esetben, amikor a röntgendiffrakció teljesen csődöt mondott, a szerkezet meghatározása éppen neutronok segítségével válik lehetővé. Ennek oka abban rejlik, hogy a struktúra-faktorok a két esetben lényegesen különböznek egymástól: a fényszóródás az elektronokon történik, ezért a röntgendiffrakció struktúra-faktorában a szóródási hosszak helyén az atomi elektronsűrűségek $\boldsymbol{\kappa}$ helyen vett Fourier-transzformáltját, az ún. „atomi szórás-faktort” találjuk. Éppen ezért csak a neutrontdiffrakció alkalmas

1. egészen kevés elektront tartalmazó atomok (H, D, stb.) rácsbeli helyzetének meghatározására, mivel ezeken számottevő fényszórás nem lép fel;

2. közel egyenlő rendszámú elemek, vagy éppen izotópok megkülönböztetésére, mivel a röntgendiffrakció szempontjából ezek „egyformák”;

3. a spintérbeli rendezettség vizsgálatára.

Példaként megemlítjük, hogy a fenti okok miatt a jég, az ammóniumsók, a ferroelektromos tulajdonságú KH_2PO_4 kristály stb. szerkezetének vizsgálatára a neutrontdiffrakció kiváló eszköznek bizonyult.

Rátérve ezután az egyfononos folyamatokat leíró tagra, a (2.21) és (2.23) képlet alapján

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{k}{k_0} \frac{\hbar}{2N^3} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \left\{ D(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{q}) \left| \sum_k A_k e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_k} e^{-W_k} \frac{\boldsymbol{\kappa} \mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q})}{\sqrt{M_k}} \right|^2 \cdot \frac{1}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \left[n(\omega) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\varepsilon \pm \hbar\omega(\alpha, \mathbf{q})) \right\}. \quad (2.40)$$

Innen azonnal leolvasható, hogy egyfononos koherens szórással csak azoknál a $\boldsymbol{\kappa}$ és ε értékeknél lép fel, amelyekre a

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\kappa} &\equiv \mathbf{q} \pmod{\mathbf{g}} \\ \varepsilon &= \pm \hbar\omega(\alpha, \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

egyenletek valamely (α, \mathbf{q}) értékeknél egyszerre teljesülnek. Mivel ez azt jelenti, hogy a neutron energia, illetve impulzusnyeresége ilyenkor éppen egy fonon energiájával, ill. kváziimpulzusával egyenlő, joggal beszélünk fonon keltéséről és elnyeléséről.

Feltételezve ezután, hogy 1. a szórással kizárólag koherens, továbbá, hogy 2. a többfononos tagok szerepe nem lényeges, a fonon adatai már igen könnyen meghatározhatók. Az első feltétel teljesülése persze magfizikai „adottság” kérdése, a második feltételről azonban a fonon-sorral kapcsolatosan mondottakból tudjuk, hogy $\boldsymbol{\kappa}$ és T megfelelő megválasztásával hogyan teljesíthető.

Most először is (1.19) alapján térjünk át a \mathbf{q} szerinti összegezésről integrálásra, ez (2.40)-ben a

$$\frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q}$$

helyettesítést jelenti. Itt lényegében azt vesszük figyelembe, hogy a mérőberendezés $\boldsymbol{\kappa}$ -t csak egy $(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa} + d\boldsymbol{\kappa})$ intervallumon belül határozza meg, melybe a kristály méreteinek, vagyis N -nek növelésével tetszőlegesen sok hullámszám esik. Ezzel felhasználva még a (2.39) képletet, elvégezve az integrálást, a következő kifejezésre jutunk:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coh}}^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{k}{k_0} \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha} \left\{ \left| \sum_k A_k e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_k} e^{-W_k} \frac{(\boldsymbol{\kappa} \mathbf{e}_k(\alpha, \boldsymbol{\kappa}))}{\sqrt{M_k}} \right|^2 \cdot \frac{1}{\omega(\alpha, \boldsymbol{\kappa})} \left[n(\omega) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\varepsilon \pm \hbar\omega(\alpha, \boldsymbol{\kappa})) \right\}. \quad (2.42)$$

Az integrálásnál a (2.39)-ben szereplő δ függvények közül természetesen csak az jött számításba, amelynél a $\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{g} = \boldsymbol{\kappa}^*$ vektor a Brillouin-zónába esik. Ezért következik az lenne, ha az ε és ω függvények argumentuma helyére a $\boldsymbol{\kappa}^*$ „redukált $\boldsymbol{\kappa}$ ”

értéket írának. Szokásosabb azonban a fenti jelölésmód, ahol az e és ω függvényeket az egész hullámszámtérben értelmezik, úgy, hogy értékük a Brillouin-zónabeli értékek periodikus ismétlődése legyen, vagyis a \mathbf{x}^* és $\mathbf{x}^* + \mathbf{g}$ helyen felvett érték ugyanaz.

Azt kaptuk tehát, hogy a

$$\varepsilon = \hbar\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x})$$

értékeknél, tehát éppen a (2.41) feltételek mellett az energia függvényében éles csúcsok lépnek fel, pontosan annyi, ahány polarizációs ág létezik, melyre $(\mathbf{x} \cdot \mathbf{e}(\mathbf{x}))$ nem 0.

Ezeket a csúcsokat megkeresve megkapjuk a \mathbf{x} -hoz (pontosabban a redukált \mathbf{x}^* vektorhoz) mint hullámszámhoz tartozó fonon-energiákat, tehát a diszperziós összefüggéseket.

Ezen a ponton azonban szólnunk kell néhány szót a különböző mérési módszerekről. A hagyományos eljárás szerint a szórt neutronok szöge és energiája a „változó”, aminek függvényében az eredményeket ábrázolják. Ez a következő hátránnyal jár: mivel a \mathbf{k}_0 vektor adott, lehetetlen rögzített $\mathbf{x} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ mellett az ε értékét változtatni, hiszen ε változásakor \mathbf{k} is megváltozik. A fonon-csúcsok persze így is fellépnek, csak a mérés tervezése és kiértékelése ε és \mathbf{x} egyidejű változása miatt érhetően bonyolultabb, a polarizációs vektorokat pedig nem is lehet meghatározni ezzel a módszerrel. Láttuk, hogy az elméleti feldolgozás számára a \mathbf{x} és ε egymástól független változtatása lenne kényelmes. Ezért dolgozták ki az ún. „konstans \mathbf{x} ” módszert. Ennek lényege [14], hogy a szórás szögével és a szórt neutronok energiájával egyidejűleg változtatják például a beeső nyaláb szögét, éspedig éppen úgy, hogy eközben \mathbf{x} állandó és csak ε változik. Ez az eljárás — nagyfokú elvi egyszerűsége mellett — módot ad arra is, hogy a fonon-csúcsok intenzitásából a polarizációs vektorokat meghatározzuk. Egyenlőre még a diszperziós összefüggések kérdésénél maradva, a konstans \mathbf{x} módszerrel történő mérés általában a következő lépésekből áll:

1. Diffrakciós úton meghatározzák a reciprok-rács alakját és helyzetét a laboratórium koordináta-rendszerében, majd ábrázolják azt a sík metszetét, melyet a mérésben szereplő \mathbf{k} és \mathbf{k}_0 vektorok meghatároznak.

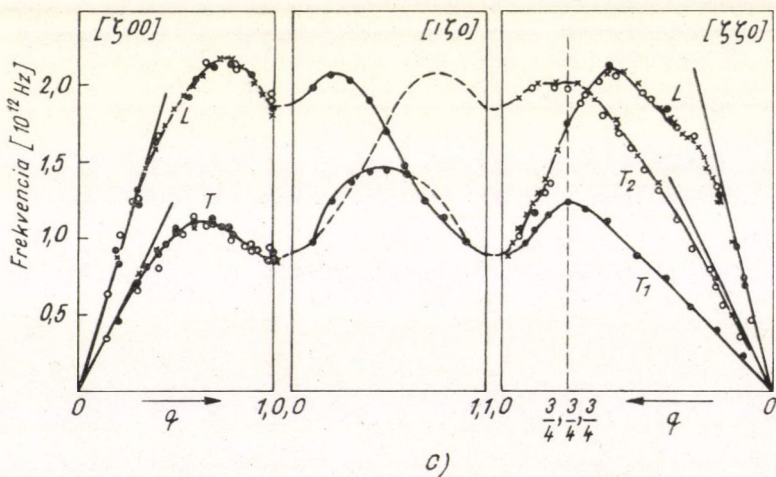
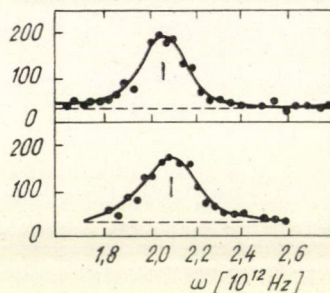
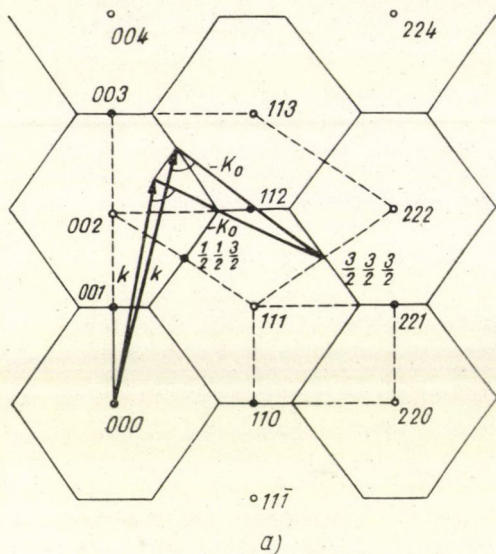
2. A kijelölt \mathbf{x} vektort rögzítve \mathbf{k} és \mathbf{k}_0 értékének változtatásával több ε mellett megméri a hatáskeresztmetszetet és megkapják a különböző polarizációknak megfelelő fonon-csúcsokat.

3. A \mathbf{x} vektorból addig vonnak le \mathbf{g} reciprokrácsvektort, míg a Brillouin-zónába eső vektorhoz jutnak, és ehhez rendelik hozzá a kapott fonon-energiákat.

Ezt illusztrálja a következő 2. ábra, mely egy Pb-on végzett mérést mutat. A mai, gépi programokkal működő konstans \mathbf{x} módszerek alkalmazásával minden olyan anyagnál, melyből egykristályok állíthatók elő, és ahol a kérdéses \mathbf{x} és ε tartomány a mérés által elérhető, rövid idő alatt elvégezhetők az adott anyag diszperziós relációinak mérése. Gondot csak a különböző polarizációs ágak helyes megjelölése okoz, azonban szimmetrikus irányokban, ahol eleve tudható, hogy az adott \mathbf{x} irányra merőleges és vele párhuzamos polarizációs vektorok léteznek, ez nagyban egyszerűsödik, a merőleges polarizációjú fononon ugyanis ekkor nem történik szórás. Kérdés azonban, hogy a termikus neutronok segítségével elérhető-e valamennyi, a Brillouin-zóna méretei által meghatározott \mathbf{q} és a fonon energiákkal megegyező ε ?

Ez a kérdéses hullámszám- és energiaintervallum anyagoként más és más, de általában

$$|q| \sim 0 - 10^8 \text{ cm}^{-1}$$



2. ábra: Diszperziós összefüggés mérése ólomban [17]. a) A reciprok rács $(1, -1, 0)$ síkjában a \mathbf{k} vektor rögzített, a $(3/2, 3/2, 3/2)$ pontba mutat. A mérést a szaggatott szakaszok mentén végezték el. b) a $(1, 1, 1)$ szimmetria irányban történő mérésnél egyedül a longitudinális polarizációt észleljük. Az energia szerinti eloszlás tehát egyetlen csúcsot tartalmaz. c) A diszperziós összefüggések néhány irányban. A szaggatott vonal a Brillouin-zóna határát jelenti, L és T a longitudinális és transzverzális polarizációt.

és a frekvenciák tipikus értékei: akusztikus fononok: $\hbar\omega \sim 0 - 30$ meV, optikai fononok: $30 - 60$ meV. Vessük fel először kissé általánosabban a kérdést. Általában igaz az, hogy a szórt részecske impulzusa és energiája, valamint a fonon adatai között fenn kell állni a

$$E - E_0 = \hbar\omega(\alpha, \mathbf{q}), \quad \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \equiv \mathbf{q} \pmod{\mathbf{g}} \quad (2.43)$$

egyenleteknek.

Nézzük, mi a helyzet például látható fény esetén. A kristályra bocsátott fény egyrésze rugalmatlanul szóródik. (Raman-szórás, Mangyelstam—Brillouin-szórás.) A szórt fény impulzusa és energiája spektroszkópiai úton mérhető, tehát a neutron-szórással analóg kísérlet elvégezhető, éspedig jóval nagyobb pontossággal. A módszer mégsem alkalmas a fonon diszperziós összefüggések mérésére. Ennek oka a következő:

Egy fonon energiája a foton hullámszámát $\Delta k = \frac{\hbar\omega}{c} \sim \frac{30 \text{ meV}}{c}$ -el változtatja meg, ez a fény $k_0 \sim \frac{3 \text{ eV}}{c}$ hullámszámához képest csak 1%. Ezért az impulzuscseré a ϑ szórási szög függvényében jó közelítéssel

$$|\mathbf{x}| \sim 2k_0 \sin \frac{\vartheta}{2} \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}.$$

Ez azt jelenti, hogy a látható fénnel csak azon a fononok tudnak kölcsönhatni, amelyek hullámszámvektorának abszolút értéke a maximális fononhullámszámnak legfeljebb ezredrésze. Ezek a hullámszámok tehát a Brillouin-zónában a $\mathbf{q} = 0$ körüli igen kis környezetben helyezkednek el, a legtöbb fonon a látható fény számára hozzáférhetetlen.

Röntgensugarak szórásakor elérjük ugyan a $\sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$ tartományt, mivel a röntgensugárzás esetén $|k_0| \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$, azonban ha egy 10 keV-os röntgen-kvantum elnyel egy $\sim 10 \text{ meV}$ energiájú fonont, relatív energiaváltozása olyan kicsiny lesz, hogy nem lehet pontosan észlelni. (Bizonyos irányokban, nem ilyen „direkt” módon, mégis lehet röntgen-sugarakkal diszperziós összefüggést mérni. A módszer intenzitásmérésen alapul, kiértékelése jóval nehezebb.)

Látjuk tehát, hogy ha a foton energiája „csak” 100-szorosa a fonon energiájának, akkor hullámszáma mintegy 10^3 -szer kisebb a rövid hullámhosszú fononénál, míg ha hullámszáma eléri a maximális fonon-hullámszámokat, energiája lesz $\sim 10^6$ -szor akkora. Ha a fény diszperziós összefüggéséhez, a

$$E = \hbar\omega = \hbar c |k|$$

képlethez hasonlóan a fononok diszperzióját egy hangsebességgel jellemezzük, ami akusztikus fononokra nem rossz becslés:

$$\hbar\omega(\alpha, \mathbf{q}) = \hbar c_h |\mathbf{q}|,$$

akkor a fenti eredményeket így lehet megfogalmazni:

A fény és a hang sebessége közötti $10^4 \sim 10^6$ -os szorzó arra vezet, hogy *fotonokkal csak $\mathbf{q} \sim 0$ tartomány fononjait tudjuk vizsgálni*. Neutronok esetén a helyzet megváltozik. A hideg és termikus neutronok adatai:

$$\begin{aligned} |k_0| &\sim 10^8 \text{ cm}^{-1} \\ E_0 &\sim 5 - 50 \text{ meV} \end{aligned} \quad (2.44)$$

és ezért általában könnyű találni olyan \mathbf{k}_0, \mathbf{k} párost, hogy (2.41) kielégüljön. Hideg neutronok szórásánál, ahol $|\mathbf{k}_0| \ll |\mathbf{k}|$ közelítőleg $\mathbf{k}_0 = 0$ -t írva,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega(\alpha, \mathbf{k})$$

adódik, és itt ismét az izotóp hangsebességgel jellemezve a diszperziót, a szórt neutronok sebességére

$$V_n = 2C_h$$

adódik, ahol V_n a neutron sebessége, C_h a hangsebesség. A tipikus hangsebesség értékekkel megegyező sebességű neutronok az $E \sim 10 - 30$ meV energiájú termikus neutronok tehát a szórás után a ~ 0 sebességű neutron termikus energiát nyer a fonon elnyelésekor. Ugyanez a helyzet akkor, ha a beeső neutronok is termikus energiájúak. Azt látjuk tehát, hogy noha a neutron energiahullámszáma összefüggése egészen más, mint a fononoké, a lényeges fonon energiák és hullámszámok olyanok, hogy kivételes esetektől eltekintve, *a neutronok bármely fonont kelthetnek, vagy eltüntethetnek.* Így segítségükkel az összes fonon diszperziós összefüggését meg lehet határozni.

Az egyfononos szórásra visszatérve, érdekes eset áll elő, ha elég kis kezdeti E_0 neutron-energia mellett a fononkeltés hatáskeresztmetszetét vizsgáljuk. Ilyenkor elég a kisebb energiájú akusztikus fononokra szorítkozni, és ezek diszperziós görbéjét jó közelítésben lineárisnak vehetjük, minthogy ω kis értékei jönnek csak számításba. Eszerint a megmaradási tételek

$$\varepsilon = \hbar\omega = \hbar c_h |\mathbf{q}|$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{q}$$

alakúak. Ezek a

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2)$$

egyenlettel együtt azonban arra vezetnek, hogy ha

$$\frac{\hbar k_0}{m} = V_n < C_h,$$

akkor fonon keltése nem lehetséges, míg

$$V_n \gtrsim C_h$$

esetén kis szögben „előre”, \mathbf{k}_0 irányába szóródó akusztikus fonon jöhet létre. Ez a fény közegbeli sebességénél gyorsabban terjedő részek fénykibocsátására a Cserenkov-effektusra emlékeztet.

Vizsgáljuk most meg a polarizációs vektorok mérésének lehetőségeit. Ez, mint már említettük csak konstans α eljárással válik lehetővé. Megjegyezzük hogy a diszperziós görbék mérésével szemben, mely mind Bravais-típusú, mind összetett kristály esetén lényegében egyforma problémát jelent, az összetett kristály (komplex) polarizációs vektorainak mérése roppant bonyolult, ezért a polarizációs vektorokat eddig csak Bravais-rácson mérték. Írjuk fel az egyfononos szórás formuláját (2.42)-

ben a k indexet elhagyva, és integráljuk ε szerint az $\varepsilon = \hbar\omega(\alpha, \mathbf{x})$ értékek körül, hogy az egyes fonon-csúcsok területét megkapjuk. Az eredmény:

$$I_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{x}) = \frac{k}{k_0} A^2 e^{-2W} \left(\frac{\hbar x^2}{2M} \right) \frac{1}{\omega(\alpha, \mathbf{x})} \left[n(\omega) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] |\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}_0|^2,$$

ahol $I_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{x})$ az $\alpha = 1, 2, 3$ polarizációjú fononhoz tartozó csúcs területe fononkeltés-kor, I_{α}^{-} elnyeléskor, \mathbf{x}_0 pedig a \mathbf{x} irányú egységvektor. Legyen először a \mathbf{k}_0 és \mathbf{k} vektorok által meghatározott sík a kristálynak egy tükörsíkja. Ekkor a polarizációs

vektorokra vonatkozó 1.33) szimmetria-megfontolások arra vezetnek, hogy két polarizációs vektor, mondjuk $\mathbf{e}(1)$ és $\mathbf{e}(2)$ a $(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ síkban fekszik, egy arra merő leges, tehát \mathbf{x}_0 -t a z irányú egységvektornak választva

$$\mathbf{e}(3)_z = \mathbf{e}(3) \cdot \mathbf{x}_0 = 0.$$

Ha tehát pl. fonon-elnyelést mérünk,

$$\frac{e(1, \mathbf{x})_z^2}{e(2, \mathbf{x})_z^2} = \frac{I_1^{-}(\mathbf{x}) \omega(1, \mathbf{x}) n[\omega(1, \mathbf{x})]}{I_2^{-}(\mathbf{x}) \omega(2, \mathbf{x}) n[\omega(2, \mathbf{x})]} \quad (2.45)$$

ami az

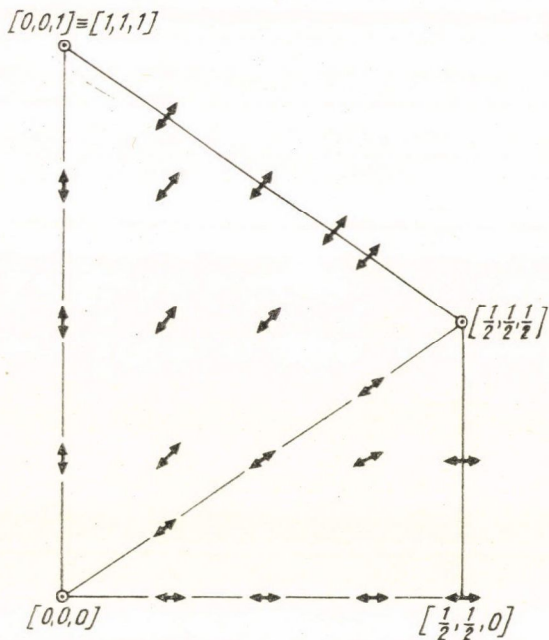
$$e(1, \mathbf{x})_z^2 + e(2, \mathbf{x})_z^2 = 1$$

(1.26/b) feltétellel együtt teljesen meghatározza $e(1, \mathbf{x})_z^2$ és $e(2, \mathbf{x})_z^2$ értékét, és ha az X, Y, Z koordinátatengelyeket úgy választjuk, hogy X a síkra merőleges legyen, akkor mivel $e(1, \mathbf{x})_x = e(2, \mathbf{x})_x = 0$, $e(1, \mathbf{x})_y^2$ és $e(2, \mathbf{x})_y^2$ is ismertté válik. A komponensek előjelét pl. a szimmetria-irányokra vonatkozó (ismert) vektorokhoz való folytonos csatlakozás feltételéből nyerhetjük, vagy egy újabb, $\mathbf{x} + \mathbf{g}$ mellett végzett mérés oszlatja el a bizonytalanságot.

Ha $(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ nem szimmetria-sík, akkor meg kell mérni például $I^{-}(\mathbf{x} + \mathbf{g})$ értékét is. Ekkor \mathbf{x}_0 változik, de az $|\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}_0|^2$ mellett álló szorzat ugyanaz marad, és maga $\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{x})$ is, tehát ezzel $\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{x})$ újabb komponensére kaptunk összefüggést. Hasonlóan legfeljebb három méréssel a polarizációs vektorok mindig meghatározhatók. [26].

Egy ilyen mérés eredményét mutatja a 3. ábra.

A mérési módszer rendkívül nagy előnye, hogy a Debye—Waller faktor, sőt a szórási hossz is kiesik a kiértékelésnél, tehát a hatáskeresztmetszet abszolút mérésénél sokkal egyszerűbb *relatív intenzitás-mérés* elegendő a polarizációs vektorok meghatározásához. A polarizációs vektorok mérésével a dinamikai tenzor megismeréséhez is közelebb jutunk. Amint láttuk, ha olyan koordináta-rendszerben írjuk fel a karak-



3. ábra: Polarizációs vektorok mérése Na-ban [10] néhány speciális irányban.

terisztikus egyenletet, melynek tengelyei a polarizációs irányok, az egyenlet lineáris egyenletté alakul, és ennek kiértékelése sokkal egyszerűbb, mint a mért frekvenciák összevetése az általában hatodfokú karakterisztikus egyenlettel. Látjuk, hogy a koherens szórás kiértékelése mind a frekvenciák, mind a polarizációs vektorok szempontjából kedvezőbben alakul, ha a mérés szimmetrikus irányban, vagy síkban történt, azonban az így nyert adatok általában nem elegendőek a dinamikai tenzor meghatározásához. A kiértékeléskor természetesen problémát jelent, hogy a mérésnél a többfononos szórás is észleljük. Ez azonban a

$$\varepsilon = \hbar\omega(\alpha_1, \mathbf{q}_1) \pm \hbar\omega(\alpha_2, \mathbf{q}_2) + \dots$$

$$\kappa \equiv \mathbf{q}_1 \pm \mathbf{q}_2 \pm \dots$$

képletek szerint nem eredményez adott κ mellett éles csúcsot az energiában: az, hogy két fonon kváziimpulzusának összege κ , még nem határozza meg a két fonon energiájának összegét. Ezért a többfononos koherens szórás „folytonos” háttérében az egyfononos szórás energia-csúcsai jól leválaszthatók. Ez a 2. ábrán jól látható.

Rátérünk most az inkohereus szórás tárgyalására.

4. Inkohereus szórás, fononspektrum

A fonon-sor első két tagját fogjuk vizsgálni. Tetszőleges kristálynál a képletből az egy elemi cellára jutó hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{d^2 \sigma^{(0)}}{d\Omega d\varepsilon} + \frac{d^2 \sigma^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} + \dots,$$

ahol

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}^{(0)}}{d\Omega d\varepsilon} = \sum C_k^2 e^{-2W_k} \delta(\varepsilon) \quad (2.46)$$

a 0-fononos és

$$\frac{d^2 \sigma^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{k}{k_0} \sum C_k^2 e^{-2W_k} \kappa T_{kk} \kappa \quad (2.47a)$$

az egyfononos hatáskeresztmetszet, melyet lényegében a

$$\kappa T_{kk} \kappa = \frac{\hbar}{2M_k} \frac{1}{N^3} \sum_{q, \alpha} \frac{1}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} |\kappa \mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q})|^2 \left[n(\omega) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\varepsilon \pm \hbar\omega(\alpha, \mathbf{q})) \quad (2.47b)$$

kifejezés határoz meg. Vizsgáljuk meg először a Debye—Waller faktort. Konkrét alakját az $\mathbf{M}_{kk}(0)$ tenzorok kifejezése alapján könnyen felírhatjuk:

$$2W_k = \frac{\hbar}{2M_k} \frac{1}{N^3} \sum_{\alpha, q} \frac{|\kappa \mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q})|^2}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} [2n(\omega) + 1],$$

vagy az utolsó tényezőt kissé átalakítva és integrálásra térve át:

$$2W_k = \frac{\hbar \kappa^2}{2M_k} \sum_{\alpha} \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \left\{ \frac{|\mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q}) \kappa_0|^2}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \text{cth} \frac{\hbar\omega(\alpha, \mathbf{q})}{2T} \right\} d\mathbf{q}. \quad (2.48)$$

Eszerint a k -adik mag Debye—Waller faktorát úgy kapjuk, hogy a

$$\frac{1}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega(\alpha, \mathbf{q})}{2T}$$

függvényt a

$$|\mathbf{e}_k(\alpha, \mathbf{q}) \boldsymbol{\kappa}_0|^2$$

„sűrűségfüggfénnyel” a Brillouin-zónában átlagoljuk, és a polarizációs ágakra összegezzük. A legegyszerűbb esetben, a *köbös szimmetriájú Bravais-rácsnál* már láttuk, hogy a polarizációs vektorok $\boldsymbol{\kappa}_0$ irányú komponensének négyzete $\frac{1}{3}$ -dal pótolható, és ω szerinti integrálásra térhetünk át:

$$2W = \frac{\hbar \kappa^2}{2M} \int_0^\infty \frac{f(\omega)}{\omega} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} d\omega. \quad (2.49)$$

A Debye—Waller faktor kvalitatív viselkedését vizsgálva, írjunk Debye-spektrumot $f(\omega)$ helyére. Egyszerű átalakítással

$$2W_D = \frac{\hbar \kappa^2}{2M} \left\{ \frac{3}{2\omega_D} + \frac{6}{\omega_D} \left(\frac{T}{\hbar \omega_D} \right) \varphi \left(\frac{\hbar \omega_D}{T} \right) \right\}, \quad (2.50)$$

ahol

$$\varphi(x) = \frac{1}{x} \int_0^x \frac{p \, dp}{e^p - 1}. \quad (2.51)$$

Láthatóan alacsony hőmérsékleten, ahol $T \ll \hbar \omega_D$, $2W \approx \frac{3}{2} \cdot \frac{\hbar \kappa^2}{2M\omega_D}$ tehát a Debye—Waller faktor csak κ^2 értékétől függ. Ahogyan a hőmérséklet növekszik, a $\varphi\left(\frac{\hbar \omega}{T}\right)$ függvény egyre inkább közelíti az 1 értéket, és dominálni fog a második, T -vel arányos tag: mind κ^2 , mind T lineárisan növeli értékét:

$$2W \sim 3 \frac{\hbar \kappa^2}{M\omega_D} \cdot \frac{T}{\hbar \omega_D}.$$

Mivel $2W = \langle (\boldsymbol{\kappa} \hat{\mathbf{u}})^2 \rangle$ fizikailag mindez azt jelenti, hogy alacsony hőmérsékleten sem tűnik el az atom kitérés-négyzetének várható értéke a 0-rezgések miatt, azonban a hőmérséklet növelésével ez a várható érték T -vel arányosan növekszik. Ez az eredmény a harmonikus oszcillátor elméletéből jólismert. Ahhoz tehát, hogy a Debye—Waller faktor ≈ 1 legyen, a

$$\frac{\hbar \kappa^2}{2M\omega_D} < 1; \quad \frac{T}{\hbar \omega_D} < 1$$

feltételeknek egyszerre kell teljesülniök. Ezek a feltételek valóban éppen a fonon-sor konvergencia-kritériumai. A Debye—Waller faktorra vonatkozó mérések mindenekelőtt igazolták a $2W \sim \kappa^2$ arányosságot, továbbá, hogy egyatomos, köbös rácsban megfelelően választott ω_D mellett a (2.50)—(2.51) formulák jól használhatók. Egészen

másként áll a helyzet összetett rács esetén. Ilyenkor semmiféle szimmetria-megfontolás nem teszi lehetővé, hogy a polarizációs vektorokat a számításból elhagyjuk, mivel a normálási összefüggések nem az egyes $(\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{q}))^2$ értékeket szabják meg, csak ezek összegét. A polarizációs vektorok, illetve a fellépő optikai frekvenciák figyelmen kívül hagyása komoly hibákra vezet. Különösen így van ez akkor, ha a szereplő atomok tömege erősen eltérő. Kéttomos kristály esetén például elég általánosan be lehet bizonyítani [27], hogy ha $M_1 \ll M_2$, akkor a könnyű mag túlnyomóan az optikai, a nehéz pedig az akusztikus rezgésekben „vesz részt”: az $|e_1(\alpha, \mathbf{q})|^2$ kifejezés az optikai ágban közel 1, az akusztikusban $\ll 1$, míg $|e_2(\alpha, \mathbf{q})|^2$ éppen ellenkezően viselkedik. Ismeretes, hogy ugyancsak $M_1 \ll M_2$ mellett az optikai ágak „összeszűkülnek”, \mathbf{q} függésük elhanyagolható, az optikai frekvenciák értéke a zónában közel állandó.

Nézzük a példa kedvéért a ZrH kristályt. Mivel $M_{Zr} = 91 M_{pr}$, ez a kristály mutatja a fenti tulajdonságokat, sőt, megvan az a különleges sajátossága is, hogy a még általában különböző, 3 optikai frekvencia értéke egybeesik. A proton Debye—Waller faktorának számításakor tehát itt csak az optikai ágak játszanak szerepet, és itt $|\mathbf{e}_{pr}(\text{opt}, \mathbf{q})|^2 = 1$. Ezzel ugyanúgy, mint a köbös Bravais-rács esetén, eljuthatunk a (2.49) képlethez, de mivel egyetlen ω_E optikai frekvencia van, a

$$f(\omega) = \delta(\omega - \omega_E)$$

ún. Einstein-féle fononspektrumot kell használnunk, mellyel a (2.50)-től teljesen eltérő

$$2W_{pr} = \frac{\hbar \kappa^2}{2M_{pr} \omega_E} \coth \frac{\hbar \omega_E}{T}$$

eredményre jutunk. A mérések [28] valóban igazolták ezt az eredményt. Általában persze nem jutunk ilyen könnyen célhoz, és a polarizációs vektorok, valamint a fononspektrum ismeretére van szükségünk a Debye—Waller faktor meghatározásához. A inkoherens rugalmas szórás azonban nemcsak a Debye—Waller faktor mérésére használható fel, hanem segítségével meg lehet határozni a berendezés felbontóképességét is.

Ezen a következőt értjük: A valóságban sohasem teljesül az a feltétel, hogy a berendezés pontosan meghatározott E_0 energiájú neutronokat enged a kristályra, és az éppen E energiával szóródottakat észleli, hanem a bejövő neutronok között bizonyos $\varphi(E_0 - E'_0)dE'_0$ valószínűséggel $(E'_0, E'_0 + dE'_0)$ intervallumba eső neutronok is vannak, és a névlegesen E energiájú neutronok észlelésekor a berendezés ideszámítja a közeli, $(E', E' + dE')$ intervallum neutronjait is, mondjuk $\psi(E' - E)dE'$ valószínűséggel. Az ideális esetben a φ és ψ függvény egyaránt δ -függvény, és a mérés az elméleti értéket adná; általában a kísérleti és az elméleti hatáskeresztmetszet között a fentiek szerint a

$$\sigma(\kappa, \varepsilon)_{\text{kis}} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(E_0 - E'_0) \psi(E' - E) \sigma(\kappa, E' - E'_0) dE'_0 dE' \quad (2.52)$$

összefüggés áll fenn; itt a $\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \sigma(\kappa, \varepsilon)$ jelölést használtuk.* Bevezetve ezután az

$$E' - E_0 = \varepsilon'; \quad \text{és} \quad E' - E = x$$

változókat,

$$\sigma(\kappa, \varepsilon)_{\text{kis}} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(\varepsilon - \varepsilon') \sigma(\kappa, \varepsilon') d\varepsilon',$$

ahol

$$\lambda(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(-z-x) \psi(x) dx.$$

Eszerint kísérletben észlelt hatáskeresztmetszet a valódi érték és a $\lambda(\varepsilon)$ ún. felbontási függvény konvolúciója.

Ezt a $\lambda(\varepsilon)$ függvényt a 0-fononos csúcs segítségével viszont könnyű meghatározni: ha ugyanis a mérésnél az egy- és többfononos folyamatok nem lényegesek, $\sigma(\kappa, \varepsilon)$ helyébe a 0-fononos tagot írva

$$\sigma(\kappa, \varepsilon)_{\text{kis}} = C^2 e^{-2W} \lambda(\varepsilon),$$

tehát a szórt neutronok energia szerinti eloszlása éppen a felbontási függvény. Mivel a felbontóképesség (legalábbis hozzátétőleges) ismerete nélkül az eredmények kiértékelése lehetetlen, $\lambda(\varepsilon)$ számítása, vagy mérése minden esetben jelentkező probléma. A mérésekhez az inkohereinsen szóró, magas karakterisztikus frekvenciájú vanádiumot használják: itt könnyű κ és T értékét úgy megválasztani, hogy $2W \ll 1$ és így lényegében csak a 0-fononos szórás lépjen fel.

Az inkohereens szórás egyfononos tagját először Bravais-rács esetén vizsgáljuk. A (2.28) képlet alapján pl. fonon elnyelésre

$$\frac{d^2\sigma_{\text{inc}}^{(1-)}}{d\Omega d\varepsilon} = C^2 \frac{k}{k_0} e^{-2W} \frac{\hbar}{2MN^3} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|e(\alpha, \mathbf{q}) \kappa|^2}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} n[\omega(\alpha, \mathbf{q})] \delta(\varepsilon - \hbar\omega(\alpha, \mathbf{q})). \quad (2.53)$$

A legegyszerűbb esetben, ha a rács köbös szimmetriát mutat, ez — mint láttuk — a

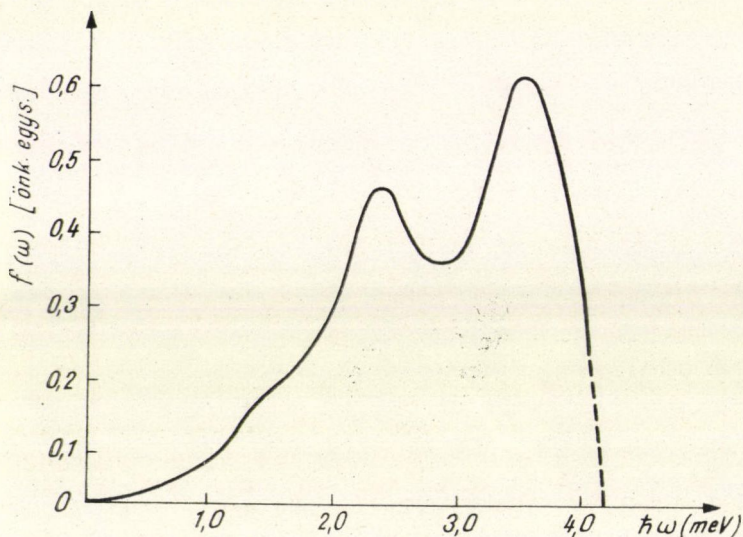
$$\frac{d^2\sigma_{\text{inc}}^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} = C^2 \frac{k}{k_0} e^{-2W} G_1(\varepsilon) \quad (2.54)$$

alakra egyszerűsödik, ahol a $G_1(\varepsilon)$ függvény a (2.29) képlet szerint arányos a fononspektrummal. Ha tehát κ és T értéke olyan, hogy a fonon-sor jól konvergál, viszont az egyfononos szórás még számottevő, akkor ennek mérésével a fononspektrumhoz jutunk.

Ezzel a módszerrel a vanádiumon kívül sikerült a Ni fononspektrumát is megmérni: olyan arányban keverték össze a target készítésénél a különböző szórási hosszakkal rendelkező Ni-izotópokat, hogy az átlagos koherens szórási hossz 0 legyen. A következő 4. ábra a Ni-rács fononspektrumát mutatja:

* Ennél az egyszerű megfontolásnál figyelmen kívül hagyjuk a hatáskeresztmetszetben szereplő $\frac{k}{k_0}$ szorzót, valamint azt is, hogy rögzített szög mellett κ is függ az ε -től, továbbá, hogy a φ és ψ függvények általában $\gamma(E_0 - E_0', E_0)$ és $\psi(E' - E, E)$ alakúak. A pontosabb tárgyalás ezt is tekintetbe veszi.

A mérés kiértékelésekor feltételezik, hogy a rugalmatlan szórás kizárólag az egyfononos szórásból ered, meghatározzák a fononspektrumot, majd ennek segítségével megbecsülik a fonon-sor további tagjaiból eredő járulékot. Ezután ezt a mérési eredményekből levonják, és az eljárást megismétlik. Világos, hogy ha a többfononos szórás valóban csak korrekcióként jelentkezik, így már néhány lépés után eljutunk a valódi spektrumhoz.



4. ábra: Ni rács fononspektruma [37] inkoherens szórási kép alapján.

A fononspektrum azonban nemcsak köbös, hanem *tetszőleges szimmetriájú Bravais-rács* esetén meghatározható, ha a méréshez nem egykristályt, hanem *polikristályos* mintát használunk. Minthogy ekkor az egyes mikrokristályok minden irányban egyforma valószínűséggel vannak elfordulva, a (2.53) hatáskeresztmetszetet átlagolnunk kell, a kristály lehetséges térbeli helyzete szerint. Ha Debye–Waller faktor értéke közel 1, akkor a (2.53) képletben jó közelítéssel helyettesíthetjük irány szerinti átlagával. Az átlagolás ezután már könnyen elvégezhető, és láthatóan a

$$(\mathbf{e}(\alpha, \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\kappa})^2 \rightarrow \frac{1}{3} \kappa^2$$

helyettesítésre vezet, amivel ismét a (2.54) kifejezésre jutunk. Összetett, pl. kétatomos rács esetén a helyzet már jóval bonyolultabb, polikristályos anyag használata sem „ejti ki” a képletből a polarizációs vektorokat. Az átlagolás ilyenkor a

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{inc}}^{(1)}}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{k}{k_0} \left\{ \frac{C_1^2}{2M_1} E_1 + \frac{C_2^2}{2M_2} E_2 \right\}$$

képletre vezet, ahol

$$E_i = e^{-2W_i} \frac{\hbar \kappa^2}{3N^3} \sum_{\alpha q} \frac{|\mathbf{e}_i(\alpha, \mathbf{q})|^2}{\omega(\alpha, \mathbf{q})} \left[n(\omega) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] d(\varepsilon \pm \hbar \omega(\alpha, \mathbf{q})).$$

Emlékezzünk azonban vissza, hogy ha a kristály egy elem különböző izotópjait tartalmazza az elemi cella mondjuk $k=1$ helyén, akkor C_1^2 a meghatározott izotóp-arány szerinti átlagérték. Vagyis, ha sikerül két olyan polikristályt előállítani, amely ugyanolyan kémiai összetételű, de az alkotórészek izotóp-elosztása a két keverékben más és más, akkor mindkettőn mérést végezve a kapott kétismeretlenes lineáris egyenletrendszerből E_1 és E_2 kiszámítható. Ezután a Debye—Waller faktorokat közelítően egyformának tekintve összeadjuk E_1 és E_2 -t, a (1.26) feltételek miatt a polarizációs vektorok eltűnnek, és ezt kapjuk:

$$E_1 + E_2 = e^{-2W} \frac{\hbar \kappa^2}{\varepsilon} \cdot p \cdot f\left(\frac{|\varepsilon|}{\hbar}\right) (e^{\frac{\varepsilon}{T}} - 1)^{-1}.$$

Az izotóppösszetételt változtatva tehát bármilyen anyag fononspektrumának mérése lehetséges, ha a szórás inkohereus. A gyakorlatban azonban éppen itt a baj: a hidrogénen, a vanádiumon és a már említett speciális nikkel izotóp-keveréken kívül a legtöbb mag koherens szórása sokkal számottevőbb az inkohereusnál. Ez persze nem akadály a frekvenciaspektrum megismerésének: közvetlen méréssel a fononspektrumot ugyan nem kapjuk meg, de a koherens szórás sokkal teljesebb adatsokasága alkalmas a fononspektrum kiszámítására: A Brillouin-zónában elég sűrűn felvett \mathbf{q} értékeknél meghatározzák a hozzátartozó $\omega(\alpha, \mathbf{q})$ frekvenciákat, majd megnézik, hogy az egyes $(\omega, \omega + d\omega)$ tartományokba hány darab frekvencia esik. A relatív eloszlás éppen a $f(\omega)$ függvény. Így határozzák meg pl. az 1. ábrán szereplő spektrumot is.

A meghatározott frekvenciaspektrumokkal több más kísérlet eredményét sikerrel tudták értelmezni (Mössbauer-effektus önnál [29]. Na fajhője [30]).

5. Néhány további probléma

Láttuk, hogy a koherens szórási képből tetszőleges kristály diszperziós összefüggései, az inkohereus szórásból fononspektruma, más szóval a harmonikus közelítés paraméterei hogyan határozhatók meg.

Az eddigi mérések tapasztalatai szerint azonban a szórási kép elemzésekor ennél sokkal több adathoz juthatunk. Mindenekelőtt a berendezés felbontóképeségének növelése módot ad a koherens fonon-csúcsok szélességének mérésére, ez pedig az anharmonikus korrekcióból eredő fonon-élettartam meghatározását teszi lehetővé [31]. A diszperziós görbéknek az elméletileg várttól való éles eltérése az elektron-fonon kölcsönhatásból eredő ún. Kohn-effektus miatt lehetőséget ad azokban a fémekben, ahol ez a kölcsönhatás erős, az elektrondinamika Fermi-felületeinek vizsgálatára. Ezek szerint a reális kristályban fellépő fonon-fonon és elektron-fonon kölcsönhatás a szórási képet jelentősen befolyásolhatja. A más atomokkal szennyezett kristályban fellépő igen rövid élettartamú, ún. lokalizált fononok frekvenciáit is sikerült megmérni [32].

A további fejlődés útja a finomabb effektusok kimutatása és pontosabb vizsgálata, másfelől a kristályhoz bizonyos értelemben hasonló struktúrák, pl. folyadékok „fonon”-jainak vizsgálata [33].

* * *

Végül szeretnék köszönetet mondani azoknak, akik a cikk megírásában segítségemre voltak: elsősorban *Kosály György* tudományos munkatársnak, aki munkámban állandóan támogatott, továbbá *Zawadowsky Alfréd* és *Hargitai Csaba* tudományos munkatársaknak az értékes diszkusszióikért.

IRODALOM

- [1] *G. Leibfried*: Gittertheorie der Mechanischen und Thermischen Eigenschaften der Kristalle, Encyclopedia of Physics VII/1. 1955.
- [2] *M. Born—K. Huang*: Dynamical Theory of Crystal Lattices, Oxford, 1954.
- [3] *A. A. Maradudin*: The Anharmonic Solid (kézirat).
- [4] *M. Tinkham*: Group Theory and Quantum Mechanics, New York, 1964.
- [5] *Dr. Marx György*: Kvantummechanika, 1957.
- [6] *A. Messiah*: Quantum Mechanics, I. köt. XII. feje., Amsterdam, 1961.
- [7] *J. Ziman*: Electrons and Phonons, Oxford, 1960.
- [8] *A. A. Maradudin—A. E. Fein*: Phys. Rev. 128, 2589. 1962. és J. J. J. Kokkedee, Physica 28, 374. 1962.
- [9] *W. Cochran*: Proc. Roy. Soc. A276, 308. és Toya, J. Rest. Ist. Catal. Hokkaido University 6, 161. 1958.
- [10] *A. D. B. Woods—B. N. Brockhouse e. a.*: Phys. Rev. 128, 1112, 1962.
- [11] *J. de Launey*: The Theory of Heat and Lattice Vibrations, Solid State Physics 2., New York, 1962.
- [12] *L. Van Hove*, Phys. Rev. 89, 1189, 1953.
- [13] *T. H. K. Barron e. a.*, Proc. Roy. Soc. 242, 478. 1957.
- [14] *B. N. Brockhouse*: Aarhus Summer School Lectures, „Phonons and Phonon Interactions”, ed. A. Bak. New York, 1964.
- [15] *D. L. Martin*, Proc. Roy. Soc. A254, 433, 1960.
- [16] *B. N. Brockhouse e. a.*, Phys. Rev. 116, 747, 1958.
- [17] *B. N. Brockhouse e. a.*, Phys. Rev. 128, 1099, 1962.
- [18] *S. H. Koenig*, Phys. Rev. 135, A 1693, 1964.
- [19] *Dr. Györgyi Géza*: Elméleti magfizika, 1961.
- [20] *B. A. Lippmann—J. Schwinger*, Phys. Rev. 79, 469, 1950.
- [21] *A. C. Zemach—R. J. Glauber*, Phys. Rev. 101, 118, 1956.
- [22] *A. Sjölander*, Arkiv für Physik 14, 315, 1958.
- [23] *Kosály György—Solt György* (kézirat).
- [24] *M. V. Kazarnovszkij—A. V. Sztyepanov*, ZsETF 47, 140, 1964.
- [25] *M. Nelkin*, Proc. Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, Vienna, 1961.
- [26] *Ju. Kagan*, ZsETF 42, 1375, 1962.
- [27] *Ju. Kagan—V. A. Maszlov*, ZsETF 41, 1296, 1961.
- [28] *W. L. Whittemore*, Ga 5744 (Report).
- [29] *V. A. Brjuchanov e. a.*, ZsETF 46, 825, 1964.
- [30] *A. E. Dixon e. a.*, Proc. Phys. Soc. 81, 973, 1963.
- [31] *B. N. Brockhouse*: Proc. Inelastic Scattering of Neutrons, Vienna. 1961.
- [32] *R. Rubin e. a.*, Physics Letters 14, 100, 1965.
- [33] *Kroó Norbert*, Phys. Rev. Letters 12, 721, 1964.
- [34] *K. S. Singvi*: Aarhus Summer School „Phonons and Phonon Interactions” ed. A. Bak, New York, 1964.
- [35] *M. Nelkin—D. E. Parks*, Phys. Rev. 119, 1060, 1960.
- [36] *J. J. J. Kokkedee*, Physica 28, 893, 1962.
- [37] *N. A. Csernapljokov, e. a.*, ZsETF 44, 858, 1963.

A ^{60}Co γ -SUGARAIVAL ELŐÁLLÍTOTT MAGIZOMÉR HATÁSKERESZTMETSZETEK KÍSÉRLETI KÖRÜLMÉNYEKTŐL VALÓ FÜGGÉSÉNEK VIZSGÁLATA*

VERES ÁRPÁD

OAB Izotóp Intézete, Budapest

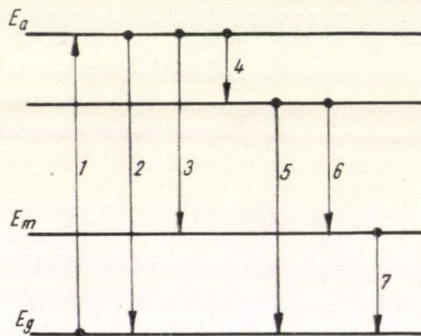
A (γ, γ') reakció alapján végzett magizomeria vizsgálatok rövid irodalmi áttekintése után a reakció hatáskeresztmetszetének a kísérleti körülményektől való függését vetjük elemzés alá. Meghatároztuk számítással ^{60}Co sugárforrásra néhány, a gyakorlatban leginkább előforduló sugárforrás forma, valamint abszorbens és target vastagságra az egyes parciális hatáskeresztmetszetekre vonatkozó összefüggéseket. A számított elméleti görbék adatait összevetjük a kísérletileg mért értékekkel.

Bevezetés

A magizomeria vizsgálatoknak fontos szerepük van az atommag szerkezetének megismerésében. A gerjesztett és izomér állapotok energiáinak ismeretében, valamint ezen állapotok energiáinak elektromágneses erők kvantumjai alakjában történő kisugárzását vizsgálva visszakövetkeztethetünk az atommag jellemző adataira és a magban végbemenő kvantumátmenetek törvényszerűségeire. Mindezek alapján az atommagok gerjesztett és izomér állapotait igen széles körű vizsgálatoknak vettették alá. Ezek közé sorolható a magfotoeffektus is. A jelenség $A(\gamma, \gamma')A^*$ reakcióval írható le, ahol A valamely atom, amelylyel a γ -kvantum kölcsönhatásba lépett és A^* ugyanazon atom izomérje. A folyamat mechanizmusa mind elméleti megfontolások, mind kísérleti tapasztalatok alapján úgy megy végbe, hogy az atommag a γ -kvantummal történő kölcsönhatás eredményeképpen egy, a metastabil nívónál nagyobb energiájú nívóra gerjesztődik ($E_m < E_a$) és onnét jut el a mag közvetlen, vagy kaszkád átmeneteken keresztül a metastabil nívót is érintve az alapnívóra. A folyamat sémája az 1. ábrán látható.

A (γ, γ') reakció alapján a kis energia tartományban (0,5—5 MeV) Waldman és munkatársai [1] 1939-ben elsőnek mutatták ki az ^{115}In és Pb metastabil nívóit.

A gerjesztést elektron gyorsítóval előállított folytonos fékezési sugárzás segítségével végezték. A kísérleti adatokat E. Guth [2] értékelte ki. Wiedenbeck [3] ezüst,



1. ábra. A metastabil nívóra történő gerjesztés energiadiagramja. Az 1 vonal az aktivációs nívóra gerjesztést, a 2,5 vonalak a metastabil nívó nélküli alapállapotba jutást, a 3 az aktivációs nívóról a metastabil nívóra történő direkt, a 4,6 pedig egy lehetséges kaszkád átmenetet, míg a 7-es vonal a metastabil nívóról az alapállapotba történő átmenetet szimbolizálja.

* Érkezett 1965. IX. 15.

kadmium, higany, stroncium, nióbbium, arany, kripton és ródium elemeket vizsgált. Több elem esetében a keletkezett izomér aktivitás értékét a gyorsító elektron energiájának függvényében is felvetették és azt találták, hogy a küszöbenergia 1 MeV körüli értéknél van, majd lépcsőzetesen újabb rezonancia nívók jelennek meg. Az elektronnyaláb energiáját 3,3 MeV-ig növelve 4–6 ugrásszerű aktivitás emelkedést észleltek, amely értékekkel egy-egy gerjesztési nívó megjelenését lehetett összefüggésbe hozni (l. 1. táblázat). *Gideon, Miller és Waldman* [4] szelént vizsgáltak egy μA -os gyorsítóval, a küszöbenergiát 0,76 MeV-re mérték és törést 1,45 MeV-nél észleltek. *Lukens, Ötvös és Wagner* [5] egy 3 MeV-os 1 mA-s Van de Graaff elektrosztatikus gyorsítóval megvizsgáltak valamennyi $Z > 4$ rendszámú elemet a nemesgázok kivételével és 23 magizomért határoztak meg.

Az ugyanezen energiatartományba tartozó és a radioaktív bomlást kísérő diszkrét energiájú γ -sugarakkal ugyancsak folytattak kísérleteket magizomerek előállítására, illetve vizsgálatára.

Az első kísérletet 1939-ben *Goldhaber, Hill és Szilárd* [6] végezték. 0,5 g radium-226 γ -sugaraival indium fémét sugároztak be, de nem tudtak izomér aktivitást kimutatni. A kísérlet negatív voltát *Guth* [2] azzal magyarázta, hogy a ^{226}Ra γ -vonalainak energiái nem esnek össze, a rezonancia tartományon belül, az indium aktivációs nívójának energiájával. Ez kétségtelenül igaz, de mivel a ^{226}Ra -nak az

1. TÁBLÁZAT
Néhány izotóp gerjesztési energianívói*

Izotóp	Metastabil nívó		Aktivációs nívók energiája (MeV)
	felezési ideje	energiája (MeV)	
Rh-103	45 perc	0,04	1,26
			1,64
			2,02
			2,37
			2,71
			3,05
Ag-107-109	40,4 sec	0,093	1,18
			1,59
			1,95
			2,32
			2,76
			3,13
Cd-111	48,8 perc	0,396	1,25
			1,68
			2,08
			2,56
In-115	4,42 óra	0,339	1,04
			1,42
			2,13
			2,63
Au 197	7,5 sec	0,407	1,22
			1,68
			2,15
			2,56
			2,97

* A táblázat túlnyomó részben a *Wiedenbeck* által közölt értékeket tartalmazza.

indium aktivációs nivójánál (1,1 MeV) nagyobb energiájú vonala is van, a sugárforrásban, a közbenső anyagban, vagy a targetban történő Compton-szóródás következtében a szórt γ -spektrumban kell lenni olyan energiájú gamma kvantumnak, amely az indiumot olyan, úgynevezett aktivációs nivóra gerjesztheti, amelyről direkt vagy kaszkád átmeneteken keresztül jut el a mag a metastabil nivóra. Mai kísérleti tapasztalataink alapján tudjuk, hogy a 0,5 g ^{226}Ra aktivitása nem volt elégséges ahhoz, hogy a Compton effektus következtében keletkezett szórt γ -kvantumok, az indium atomokkal történő kölcsönhatás eredményeképpen, méréssel kimutatható számú izomér magot hozzanak létre.

G. Harbottle [7] a 100—1800 Curies ^{60}Co és az 1300 C-s ^{182}Ta sugárforrások γ -sugarai által létrehozott $^{115\text{m}}\text{In}$ és $^{111\text{m}}\text{Cd}$ izomereket próbálta felhasználni az említett sugárforrások dózisintenzitásának meghatározására. Az indium esetében 1 kr/óra dózisintenzitás által létrehozott izomér aktivitás 0,1—0,2 cpm/g között mozgott a kísérleti körülményektől függően. Harbottle kísérlete esetében a ^{60}Co primér γ -kvantumjaira vonatkoztatott aktivációs hatáskeresztmetszetet az $^{115\text{m}}\text{In}$ -re 10^{-33} cm^2 nagyságrendűnek becsülte. Később N. Ikeda és K. Yoshihara [8—9] japán kutatók a közölt kísérleti adatok alapján újra kiszámolták a hatáskeresztmetszetet és azt $(1,8\text{—}2,5)10^{-32}\text{ cm}^2$ értékűnek találták. Az említett japán szerzők az indium—115m és a kadmium—111m-en kívül vizsgálták még a rádium, ezüst, stroncium és a lutécium izomérjeit. A kísérletekhez 40—10000 Curies kobalt—60 sugárforrásokat használtak. A szerző és munkatársai [10—13] az említett izomereken kívül — 424, 1310, 2900 Curies ^{60}Co források felhasználásával — még további 7 izomért vizsgáltak meg. Meghatározták az izomerek hatáskeresztmetszetét és becslést végeztek az aktivációs nivóról a metastabil nivóra történő átmeneti valószínűségekre, azaz a parciális nivószélességekre is.

A japán és magyar szerzők diszkultálták a jelenség néhány gyakorlati alkalmazási lehetőségét is. Ezek főleg analitikai vizsgálatokra, sugárforrások aktivitásának mérésére és dózisintenzitások meghatározására irányultak.

K. Yoshihara 30, 50 és 70%-os összetételű indium-ón ötvözetet vizsgált és a módszerrel kimutatható meghatározási pontosság elérte a 3%-ot. A szerző által használt 3 kC-s kobalt-60 sugárforrással 20 g-os mintákat használva az egyes elemekből a minimálisan detektálható mennyiségeket határozta meg. Ez indium esetében 1 mg vagyis $5 \cdot 10^{-30}\%$ -os koncentrációjú szennyeződés kimutatására alkalmas. Az effektus felhasználásával 10 C feletti kobalt-60 sugárforrások aktivitása is meghatározható. Ezenkívül alkalmas még a módszer valamennyi, a ^{60}Co -hoz hasonló nagyságrendű aktivitású és 1,1 MeV-nél nagyobb γ -kvantum energiával bíró radioizotóp aktivitásának mérésére is. Dózisintenzitások meghatározására N. Ikeda, K. Yoshihara és K. Shirnada $2 \times 3\text{ cm}$ indium fóliával folytattak vizsgálatokat. Az 1,04 MeV feletti γ -kvantumokból eredő dózisintenzitásra kapott eredményeik jó egyezést mutattak a kémiai és a Viktorien doziméterekkel mért értékekkel. A fal közelében a többszörös szóródások miatt az egyezés nem volt teljesen kielégítő. K. Yoshihara egy újabb méréssel kísérletileg meghatározva a többszörös szóródásból eredő korrekcióikat (dose bild up factor) és az effektív hatáskeresztmetszetet 20% belüli pontosságot ért el. A módszer különösen jól használható 10^7 rad/óra és annál nagyobb dózisintenzitások meghatározására.

A kísérleti körülmények befolyása a hatáskeresztmetszetek értékére

Méréseink során az egyes különböző intenzitású, méretű és geometriai elrendezésű ^{60}Co sugárforrásokkal az egy adott izomér esetében meghatározott hatáskeresztmetszet értékek a hibahatár feletti eltéréseket eredményeztek. Ugyanígy jelenség volt megfigyelhető a ^{115}In hatáskeresztmetszeteire az említett japán szerzők munkáiban is. A 2. táblázatban foglaltuk össze a kísérletek során meghatározott hatáskeresztmetszeteket, összehasonlítva a más szerzők által kapott értékekkel.

A hatáskeresztmetszet értékekre a kísérleti elrendezés azért van befolyással, mert ezeket a mérések során a kutatók az alkalmazott sugárforrás primér γ -kvantumaira vonatkoztatták. Ez a kísérleti körülményektől való függés elkerülhető, ha a hatáskeresztmetszet értékeket nem a primér spektrumra, hanem a kölcsönhatásban résztvevő energiájú szórt γ -kvantumokra vagyis az úgynevezett mikrospektrumra

2. TÁBLÁZAT

Néhány izomér kísérleti hatáskeresztmetszetének irodalmi adatai

Izomér	Felezési idő	Kísérleti hatáskeresztmetszet (σ) 10^{-32} cm^2	Szerzők a közl. való hivatkozással
^{77}mSe	18 sec	9,5	Veres [10]
^{87}mSr	2,8 óra	2,2	Yoshihara [8]
		0,85	Veres [10]
^{90}mY	16 sec	0,08	Veres [10]
^{103}mRh	58 perc	2,5	Ikeda és Yoshihara [7]
		2,2, 3	Yoshihara [8]
		2,3	Veres [10]
$^{107}\text{m}, ^{109}\text{mAg}$	44 sec	0,7—1,2	Ikeda és Yoshihara [7]
	39 sec	0,8	Veres [10]
^{111}mCd	49 perc	1,2	Ikeda és Yoshihara [7]
		1,4	Veres [9]
^{113}mCd	14 év	1,4	Veres és Ozsgyányiné [12]
^{113}mIn	1,7 óra	1,2	Veres és Pavlicsek [11]
^{115}mIn	4,5 óra	1,9—2,5	Ikeda és Yoshihara [7]
		3,5—5,3	Yoshihara [8]
		0,1	Harbottle
		(1,3—2,5)**	
		8,3	Veres [9]
		4,9	Veres és Pavlicsek [11]
^{176}mLu	3,7 óra	100—240	Yoshihara [8]
^{179}mHf	19 sec	1.	Veres [10]
^{195}mPt	3,5 nap	0,2	Veres [10]
^{197}mAu	7,2 sec	0,07	Veres [10]
^{199}mHg	42 perc	0,005	Veres [10]

** A zárójelben levő értékeket a (7) alatt említett japán szerzők számolták ki Harbottle kísérleti adataiból.

adjuk meg. Ez a mikrospektrum a kísérleti adatok ismeretében a Klein—Nishina formula alapján kiszámítható.

Ha azonban az irodalomban használatos primér γ -kvantumokra vonatkoztatott hatáskeresztmetszettel számolunk, a kísérleti körülményektől való függést úgy vehetjük figyelembe, hogy a hatáskeresztmetszetet a kísérletet befolyásoló komponensekre bontjuk szét és azok hatását egyenként vesszük figyelembe. Ennek megfelelően a σ -hatáskeresztmetszet értéket négy komponensre bonthatjuk szét:

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 \quad (1)$$

ahol a σ_1 a sugárforrás anyagában, a σ_2 a forrás és a target közötti úgynevezett közbenső anyagban, a σ_3 a védőfaltól származó, a σ_4 pedig a target anyagában keletkező szóródás figyelembe vételére szolgál. Az egyes komponensek a σ_3 kivételével könnyen számolhatók. A σ_3 a többszörös szóródás és a védőfal változatossága miatt viszont csak rendkívül nehezen számolható. Ezért ennek értékét inkább kísérletileg határozzák meg. Az alábbiakban néhány különböző alakú forrásra, a közbenső anyagra és a targetra felírjuk azokat a formulákat, amelyekkel az egyes komponensek változása figyelembe vehető.

1. A sugárforrásban és a közbenső anyagban történő szóródás alapján számolt hatáskeresztmetszet érték

A számítás menete függ a sugárforrás geometriai alakjaitól és méreteitől. Jelen munkában a leggyakrabban előforduló típusokra vonatkozó adatok meghatározására szorítkozunk.

a) Gömb alakú sugárforrások

Gömb alakú sugárforrás feltételezése esetén az (1) alatt említett σ_1 és σ_2 hatáskeresztmetszeteket a következőképpen számolhatjuk ki: valamely N atomot tartalmazó target A aktivitása, ha csak a sugárforrás anyagában bekövetkező Compton-szóródást vesszük figyelembe a következő egyenlet segítségével határozható meg:

$$A = N\sigma'_1 f S, \quad (2)$$

ahol σ'_1 a hatáskeresztmetszet, $S = 1 - e^{-\lambda t}$ a telítési tényező, amelyben t a besugárzás ideje és f a primér γ fluxus. Az aktivációs nívó rezonancia tartományára ugyancsak fennáll az

$$A = N\sigma_a f_a S \quad (3)$$

egyenlet, ahol σ_a az abszorpciós hatáskeresztmetszet f_a pedig a rezonancia tartományba szóródott fluxus. A két utóbbi egyenletből következik

$$\sigma'_1 = \sigma_a \frac{f_a}{f} \quad (4)$$

A gömb alakú sugárforrás középpontjában az f_a értékét megkapjuk, ha az egy r

és $r + dr$ elemi gömbhéjban keletkezett df_a értékét integráljuk a gömb R sugarára

$$f_a = \int df_a = \int_0^R 4\pi n_{01} r^2 dr \Phi \frac{f}{4r^2 \pi} = n_{01} \Phi f R \quad (5a)$$

ahol n_{01} a sugárforrás anyagának egységnyi térfogatában levő elektron sűrűség és Φ a reakció létrejöttéhez szükséges energiájú gamma kvantum keletkezésének, az egy elektronra vonatkoztatott hatáskeresztmetszete, amely differenciális hatáskeresztmetszet az aktivációs nívószelességnek megfelelő Δk energia intervallumra a Klein—Nishina formulával adható meg.

A sugárforrás anyagában történő abszorpció figyelembevétele alapján az előző (5a) egyenletbe f_a helyébe $f_a e^{\mu_1 R}$ és az $f/4r^2\pi$ helyébe $f e^{\mu_1 R}/4r^2\pi$ írva

$$f_a = n_{01} \Phi f e^{(\mu_1 - \mu'_1)R} \int_0^R e^{-\mu_1 r} dr = \frac{n_{01} \Phi f}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1)R} (1 - e^{-\mu_1 R}) \quad (5b)$$

ahol μ_1 és μ'_1 a sugárforrás abszorpciós koefficiensei, az eredeti és a rezonancia kvantum energiáknak megfelelően.

A (4) és (5a) egyenletek alapján

$$\sigma'_1 = n_{01} \sigma_a \Phi R. \quad (6)$$

A (4) és (5b) egyenletekből pedig

$$\sigma'_1 = \frac{n_{01} \Phi \sigma_a}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1)R} (1 - e^{-\mu_1 R}) \quad (7)$$

A σ'_1 -t egy k tényezővel megszorozva megkapjuk a σ_1 -t.

$$\sigma_1 = \sigma'_1 k = \sigma'_1 e^{(\mu_2 - \mu'_2)d} \quad (8)$$

Ezzel a k tényezővel a sugárforrás és a target között elhelyezkedő, a mérés folyamán nem eliminálható közbenső anyagban történő abszorpciót vettük figyelembe, mind a primér, mind a szórt γ -kvantum energiákra. A μ_2 és μ'_2 az ezekhez tartozó abszorpciós koefficiensek, míg d a közbenső anyag vastagsága.

Az előzőhöz hasonló gondolatmenet alapján σ'_2 -re a következő egyenlethez juthatunk:

$$\sigma'_2 = n_{02} \sigma_a \Phi d, \quad (9)$$

ahol n_{02} a közbenső anyag egységnyi térfogatának elektron sűrűsége. A primér és rezonancia energiatartományba tartozó energiájú γ -kvantumok abszorpcióinak figyelembevétele után az f_a értékre a következőket írhatjuk fel:

$$f_a = \int_r^{r_1+d} n_{02} \Phi f e^{-\mu_2(r-r_1)} e^{-\mu_2(r_1+d-r)} dr = \frac{n_{02} \Phi f}{\mu'_2 - \mu_2} [1 - e^{-(\mu'_2 - \mu_2)d}] \quad (10)$$

Ennek és σ'_2 (4)-hez tartozó összefüggés érvényessége alapján σ'_2 -t az alábbi egyenlettel fejezhetjük ki:

$$\sigma'_2 = \frac{n_{02} \Phi \sigma_a}{\mu'_2 - \mu_2} [1 - e^{-(\mu'_2 - \mu_2)d}] \quad (11)$$

b) Korong alakú sugárforrások

Korong alakú sugárforrások esetében a 2. ábrán látható és az eddig használt jelölések mellett a számításokat a következőképpen végezhetjük el:

Meghatározzuk az A pontban a szórt, azaz a rezonanciatartományba eső differenciális γ -fluxust. Ez az alábbi képlettel írható fel:

$$df_a = \frac{n_{01}\Phi}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1)x} (1 - e^{-\mu_1 x}) df \quad (12)$$

ahol

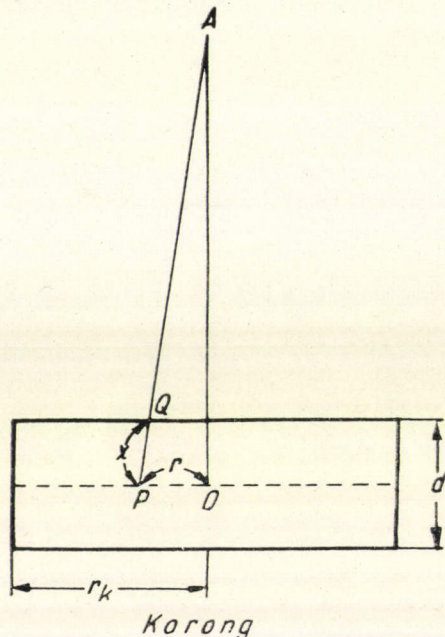
$$x = \frac{d}{2} \frac{(h^2 + r^2)^{1/2}}{h} \quad (13)$$

A df értéke pedig

$$df = \frac{af_a}{4\pi(r^2 + h^2)} e^{-\mu'_1 x} r dr d\theta \quad (14)$$

A gömb alakú forráshoz hasonlóan itt is érvényes az alábbi összefüggés:

$$\sigma'_{k1} = \frac{\sigma_a f_a}{f} = \frac{\sigma_a \int df_a}{\int df} \quad (15)$$



2. ábra. Aktiválás korong alakú sugárforrással. A target az A pontban helyezkedik el.

A (12) egyenletből való behelyettesítés után

$$\sigma'_{k1} = \frac{\sigma_a \int n_{01} \Phi e^{(\mu_1 - \mu'_1)x} (1 - e^{-\mu_1 x}) df}{\mu_1 \int df} \quad (16)$$

Bevezetve a

$$\sigma'_1(x) = \frac{n_{01}\sigma_a\Phi}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1)x} (1 - e^{-\mu_1 x}) \quad (17)$$

jelölést, valamint integrálva az egész korongra az r szerint 0-tól r_k -ig és θ szerint 0-tól 2π -ig kapjuk, hogy

$$\sigma'_{k1} = \frac{\int_0^{r_k} \sigma'_1(x) e^{-\mu_1 x} \frac{r}{r^2 + h^2} dr}{\int_0^{r_k} e^{-\mu_1 x} \frac{r}{r^2 + h^2} dr} \quad (18)$$

A (18) egyenlet közelítő megoldását az alábbi összegzési formula segítségével adhatjuk még meg.

$$\sigma'_{k1} = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma_1(x_i) e^{-\mu_1 x_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2} \Delta r}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_1 x_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2} \Delta r} = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma_1(x_i) e^{-\mu_1 x_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2}}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_1 x_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2}} \quad (19)$$

amelyben az r_i , az $\frac{1}{r_i^2 + h^2}$ és az $e^{-\mu_1 x_i}$ a hatáskeresztmetszet mértékét befolyásoló súlyfaktorok. Ha $h \gg r$, akkor a (13) alatti összefüggés $x \approx \frac{d}{2}$ alakúra egyszerűsödik és a (17) egyenlet a következő alakot ölti:

$$\sigma_1\left(\frac{d}{2}\right) = \frac{n_{01} \sigma_a \Phi}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1) \frac{d}{2}} \left(1 - e^{-\mu_1 \frac{d}{2}}\right) \quad (20)$$

A $\sigma_1\left(\frac{d}{2}\right)$ -nek a (19) egyenletbe történő helyettesítés után könnyen belátható, hogy

$$\sigma'_{k1} = \sigma'_1\left(\frac{d}{2}\right) \quad (21)$$

Tehát:

$$\sigma'_{k1} = \frac{n_{01} \sigma_a \Phi}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1) \frac{d}{2}} \left(1 - e^{-\mu_1 \frac{d}{2}}\right) \quad (22)$$

Az elemi számítások elhagyásával a közbenső anyagtól származó hatáskeresztmetszetet pedig a következő egyenlettel írhatjuk le:

$$\sigma'_{k2} = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma'_2(x'_i) e^{-\mu_2 x'_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2}}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_2 x'_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2}} \quad (23)$$

ahol

$$\sigma'_2(x'_i) = \frac{n_{02} \sigma_a \Phi}{\mu'_2 - \mu_2} \left[1 - e^{-(\mu'_2 - \mu_2) x'_i}\right] \quad (24)$$

A (18) egyenletnél említettek érvényessége mellett, valamint a (17) és (24) egyenletek segítségével a $\sigma(x_i, x'_i)$ -t a következőképpen írhatjuk fel:

$$\sigma(x_i, x'_i) = \sigma_1(x_i) e^{(\mu_2 - \mu'_2) x'_i} + \sigma'_2(x'_i) \quad (25)$$

Ennek alapján korong alakú forrás esetén a forrás és a közbenső anyagtól származó σ_k -ra a következő egyenlethez jutunk:

$$\sigma_k = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma(x_i, x'_i) e^{-\mu_1 x_i - \mu_2 x'_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2}}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_1 x_i - \mu_2 x'_i} \frac{r_i}{r_i^2 + h^2}} \quad (26)$$

c) Henger alakú sugárforrások

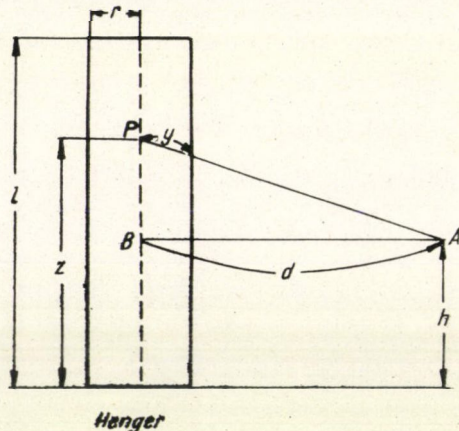
Henger alakú sugárforrások esetében a számítások teljesen analógok a korongnál végzetekhez, ezért a 3. ábrán szereplő jelölések mellett az alábbi egyenleteket írhatjuk fel.

$$\sigma'_1(y) = \frac{n_{01} \sigma_a \Phi}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1)y} (1 - e^{-\mu_1 y}) \quad (27)$$

$$\sigma'_2(y'_i) = \frac{n_{02} \sigma_a \Phi}{\mu'_2 - \mu_2} [1 - e^{-(\mu'_2 - \mu_2)y'_i}] \quad (28)$$

$$\sigma'_{s1} = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma'_1(y_i) e^{-\mu_1 y_i} \frac{1}{d^2 + (z-h)^2}}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_1 y_i} \frac{1}{d^2 + (z-h)^2}} \quad (29)$$

$$\sigma'_{h2} = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma'_2(y'_i) e^{-\mu_2 y'_i} \frac{1}{d^2 + (z-h)^2}}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_2 y'_i} \frac{1}{d^2 + (z-h)^2}} \quad (30)$$



3. ábra. Aktiválás henger alakú sugárforrással. A target az A pontban helyezkedik el.

és a

$$\sigma(y_i, y'_i) = \sigma'_1(y_i) e^{(\mu_2 - \mu'_2)y'_i} + \sigma'_2(y'_i) \quad (31)$$

alapján

$$\sigma_h = \frac{\sum_{i=1}^m \sigma(y_i, y'_i) e^{-\mu_1 y_i - \mu_2 y'_i} \frac{1}{d^2 + (z-h)^2}}{\sum_{i=1}^m e^{-\mu_1 y_i - \mu_2 y'_i} \frac{1}{d^2 + (z-h)^2}} \quad (32)$$

Itt is érvényes, hogy ha a besugárzandó targetot a sugárforrástól nagy távolságra helyezzük el, akkor formulánk egyszerűsödik. Ugyanis ha $d \gg (z-h)$, akkor $y \approx r_h$ és ezek figyelembevétele mellett a következő összefüggéseket írhatjuk fel:

$$\sigma'_1(y_i) = \sigma'_1(r_h) = \text{konstans} \quad (33)$$

$$\sigma'_{h1} = \sigma_1(r_h) = \frac{n_{01} \sigma_a \Phi}{\mu_1} e^{(\mu_1 - \mu'_1)r_h} (1 - e^{-\mu_1 r_h}) \quad (34)$$

$$\sigma'_{h2} = \sigma_2(r'_h) = \frac{n_{02} \sigma_a \Phi}{\mu'_2 - \mu_2} [1 - e^{-(\mu'_2 - \mu_2)r'_h}] \quad (35)$$

A (32) egyenlet tehát:

$$\sigma_h = \sigma(r_h, r'_h). \quad (36)$$

2. A sugárforrás tartójának befolyása a hatáskeresztmetszetre

Mint már az előzőekben említettük a σ_3 értéket számolással meghatározni, illetve megbecsülni a faleffektus komplex volta illetőleg a többszörös szórások miatt rendkívül nehéz, sőt majdnem lehetetlen. Ezért ilyen esetekben azt az eljárást szokták alkalmazni, hogy az adott berendezésre kísérletileg határozzák meg az alkalmazott abszorbensek mellett a dózisznövelési tényezőt, (dose build up factor) a B -t.

Valamely sugárforrástól meghatározott távolságra levő D_0 dózisintenzitás, ha az adott pont és a sugárforrás között d vastagságú abszorbens van, az abszorpcióra érvényes exponenciális törvény alapján

$$D = D_0 e^{-\mu d} \quad (37)$$

értékre csökken, ha csak a direkt sugárnyalábot vesszük figyelembe. Nem kollimált nyaláb esetén azonban, valamint a többszörös szóródás fellépte és a fal effektus következtében a D csak akkor fogja az adott pontban a dózisintenzitás helyes értékét adni, ha ezek hatását a képletben is figyelembe vesszük. Így a (37) egyenlet a következőképpen alakul:

$$D_t = B D_0 e^{-\mu d}. \quad (38)$$

A B értékének kísérleti vizsgálatát *K. Yoshihara* úgy végezte, hogy a kobalt-60 γ -fluxus alapján meghatározta a D értékét. 1 r/ó dózisintenzitást kobalt-60 esetében, $4,35 \cdot 10^5$ γ -kvantum $\text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$ fluxusnak tekintett. Majd *Viktorien* és kémiai dózismérővel meghatározva az adott pontban a dózisintenzitást becsülte a B értékét. A B értéke, ha vas abszorbenst 0–10 cm-ig növelte, 1-ről 1,37-re növekedett.

A kísérleti részben bemutatjuk a σ_3 értékének meghatározására általunk végzett vizsgálatokat. A berendezés falától származó értékváltozást a 8. ábrán szemlélítjük.

3. A target anyagának befolyása a hatáskeresztmetszetre

Az 1. képletben szereplő σ_4 értékének számolását ugyancsak az eddigi megfontolásokhoz hasonló módon végezhetjük el. Egy N atomot tartalmazó l vastagságú targetban egy x rétegvastagság után a target magok száma $\left(1 - \frac{x}{l}\right) N$ -nel egyenlő. Egy dx rétegben keletkező az abszorbens rezonancia tartományba szórt γ -kvantumok száma pedig

$$dfa = n_{04} \Phi f_4 dx, \quad (39)$$

ahol n_{04} a target anyag elektron sűrűsége, az f_4 pedig a target elhelyezkedési pontjában jelenlevő direkt γ -fluxus. A dx rétegben keletkezett aktivitást a következő egyenlettel adhatjuk meg:

$$dA = \left(1 - \frac{x}{l}\right) N f_a S = n_{04} \sigma_a \Phi f_4 N \left(1 - \frac{x}{l}\right) S dx \quad (40)$$

és integrálás után

$$A = \int N \sigma_a n_{04} \Phi \left(1 - \frac{x}{l}\right) S dx = \frac{1}{2} N \sigma_a n_{04} \Phi f_4 l S \quad (41)$$

Másrészt viszont a σ'_4 -vel felírható, hogy

$$A = N\sigma'_4 f_4 S. \quad (42)$$

A (41) és (42) egyenletekből következik

$$\sigma'_4 = \frac{1}{2} n_{04} \Phi \sigma_a l. \quad (43)$$

Mivel a target anyagában végbemenő abszorpciót is figyelembe kell venni, a (39) egyenletben az f_4 helyett $f_4 e^{-\mu x}$ -t kell használnunk, ahol a μ_4 a target abszorpciós koefficiense. Így tehát

$$A = \int_0^l N \sigma_a n_{04} \Phi f_4 e^{-\mu_4 x} \left(1 - \frac{x}{l}\right) S dx = \frac{N \sigma_a n_{04} f_4 S}{\mu_4} \left(1 + \frac{1}{\mu_4 l} + \frac{e^{-\mu_4 l}}{\mu_4 l}\right) \quad (44)$$

$$\sigma'_4 = \frac{n_{04} \Phi \sigma_a}{\mu_4} \left[1 - \frac{1}{\mu_4 l} + \frac{e^{-\mu_4 l}}{\mu_4 l}\right] \quad (45)$$

A kísérleti és elméleti eredmények értékelése

Az elméleti megfontolások alapján levezetett összefüggésekből látható, hogy a hatáskeresztmetszet változás a különböző atomi állandók és jellemzők mellett milyen mértékben függ a sugárforrás méreteitől, illetve alakjától. Az összefüggések alapján ábrázolt görbék segítségével gyorsan meghatározhatjuk azokat a sugárforrás abszorbens és target méreteket, amelyek mellett a legoptimálisabb eredményeket érhetjük el a módszer olyan gyakorlati alkalmazásaiban, mint az egyes sugárforrások aktivitásának mérése vagy az egyes target elemekre vonatkozó analitikai meghatározások.

Az alábbiakban csak a kísérletünkben felhasznált alakú sugárforrásra, abszorbensekre és targetra vonatkozó elméleti görbéket adjuk meg. A σ_2 -re vonatkozó elméleti görbéket azokra a különböző abszorbensekre szerkesztettük meg, amelyekre előzőleg kísérleti méréseket végeztünk.

A 4. ábra egy korong alakú forrásra és targetra számított görbét ábrázol. A számolást kobalt-60 sugárforrásra és indium targetra a (20), illetve a (45) alatt szereplő egyenletekkel végeztük az egyes paraméterek alábbi értékeivel:

$$n_{01} = 2,4 \cdot 10^{24} \text{ cm}^{-3}; \quad n_{04} = 1,88 \cdot 10^{24} \text{ cm}^{-3}; \quad \mu_1 = 0,473 \text{ cm}^{-1};$$

$$\mu'_1 = 0,513 \text{ cm}^{-1}; \quad \mu_4 = 0,497 \text{ cm}^{-1}; \quad \sigma_a = 10^{-22} \text{ cm}^2 \text{ és}$$

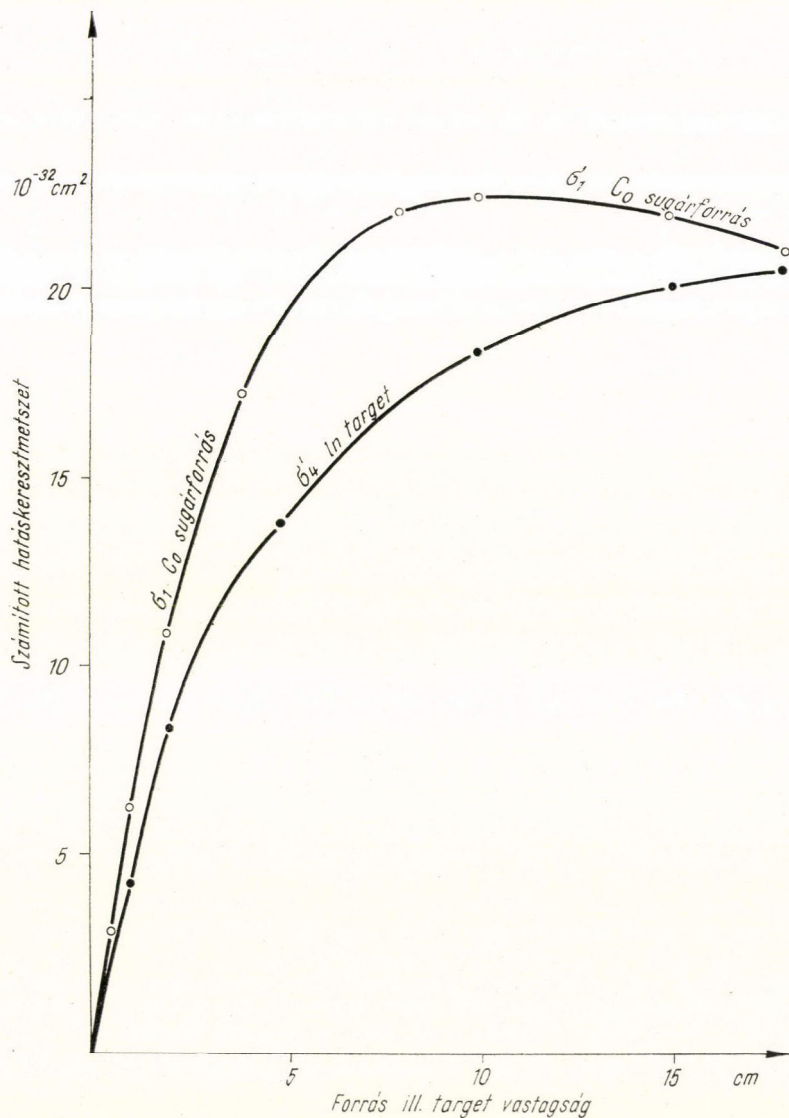
$$\Phi = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{2} = 6,1 \cdot 10^{-34} \text{ cm}^2,$$

a Klein—Nishina által a differenciális hatáskeresztmetszetre levezetett formula alapján, a ^{60}Co 1,17 és 1,33 MeV-es energiáival, az indium 1,04 MeV-es aktivációs nívóenergiájával és ennek a nívónak $4 \cdot 10^{-3}$ eV-os szélességével számolva.

A görbe menetéből láthatóan 8 cm feletti forrásvastagságok már nem növelték a hatáskeresztmetszet értékét, hanem csökkentették. Ezért ilyen források alkalmazása már célszerűtlen. A targetnál is közel hasonló helyzet áll fenn.

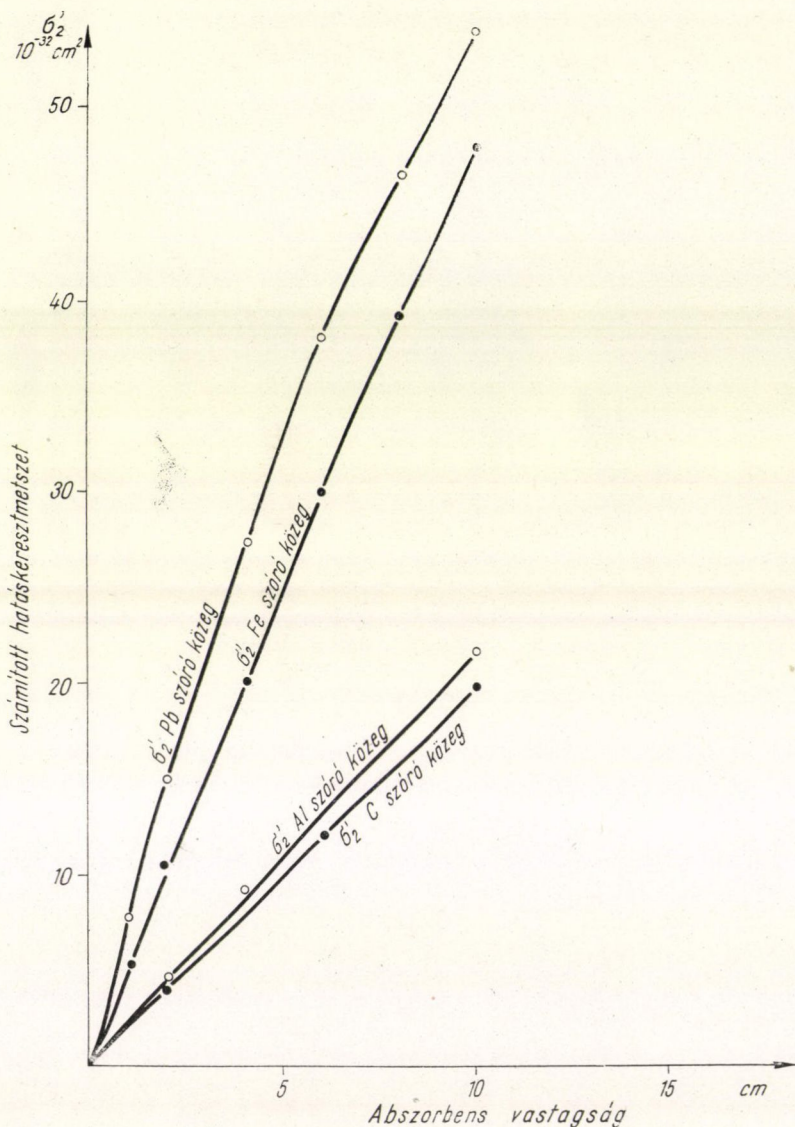
Az 5. ábrán az ólom, vas, alumínium és grafit abszorbensek elméleti görbéi láthatók a (35) egyenlet alapján számolva. A görbék az egyenestől a nagyobb vastagságok felé enyhén elhajlanak. Ez a nagyobb rendszámú vas és ólom esetében már észrevehető.

A kísérleti görbék felvételéhez egy 2460 C aktivitású kobalt-60 sugárforrást használtunk. A forrás aktív mérete $\varnothing 21 \times 18,5$ mm, az inaktív mérete pedig 23×23



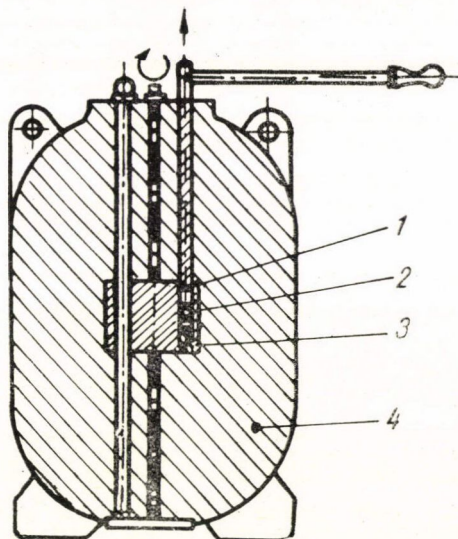
4. ábra. A (γ, γ') reakció alapján a különböző forrás és targetvastagságokra számított aktivációs hatáskeresztmetszet

mm volt. A sugárforrás a 6. ábrán látható ólomtartóban helyezkedett el. A besugárzáshoz használt manipulátor úgy volt kiképezve, hogy az ólomvédelemmel ellátott cső végére csatlakozott az indium target, illetve a közbelső abszorbenseket tartalmazó alumínium tok. Ebben változtatható volt mind a target és a forrás közötti távolság, mind az abszorbens vastagság.



5. ábra. A (γ, γ') reakció alapján különböző vastagságú szén, alumínium, vas és ólom közbelső anyagokra számított aktivációs hatáskeresztmetszetek

A besugárzásokat elvégeztük abszorbensek nélkül a forrás felületére helyezett tarrgettal, majd változtattuk a távolságot 3,4 és 10 cm-re a forrás felületétől. Ugyancsak végeztünk méréseket 2,4—6 cm-es ólom és 2,4 cm-es vas, alumínium és grafit abszorbensekkel. A besugárzás után a keletkezett indium-115 m aktivitását a felvett spektrumból a csúcs alatti terület alapján határoztuk meg. Az $\Omega\varepsilon$ tényezőt, amely a mérésnél alkalmazott Ω geometriai elrendezésnek és a NaJ(Tl) kristály ε effektivitásának figyelembevételére szolgál ismert aktivitású és a tarrgettal azonos méretű



6. ábra. Besugárzó berendezés 1. tarrget, 2. abszorbens (közbenső anyag), 3. sugárforrás, 4. ólomvédelem

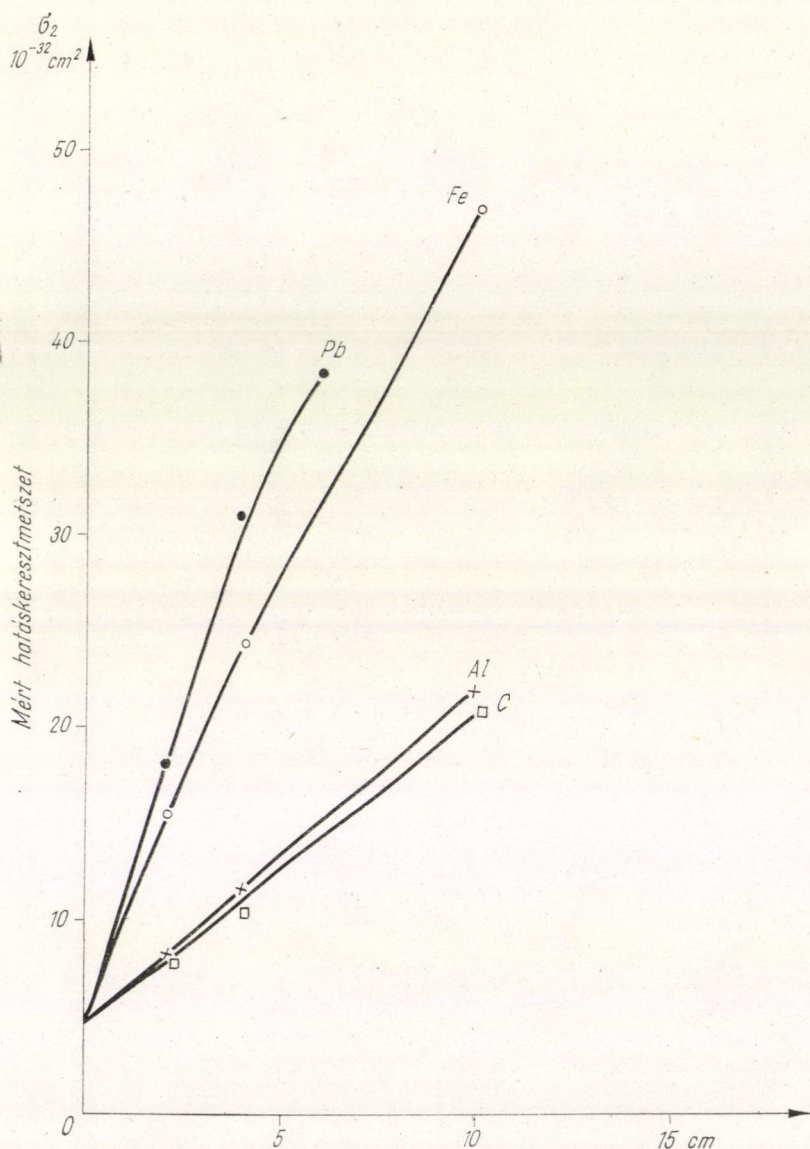
Cr-51 minta segítségével határoztuk meg. Ezt korrekció nélkül megtehettük, mivel az In-115m γ -vonalának energiája 335 KeV a Cr-51-é pedig 325 KeV. A keletkezett izomér aktivitás mérést KFKI tip. 128 csatornás analízátorral és GOM detektorral végeztük. A háttér csökkentése szempontjából a detektort 15 cm-es falvastagságú vastoronyba helyeztük. Így a háttér kevesebb, mint 1%-a volt a 10 g In tarrget beütésszámának. Ez 2000 cpm nagyságrendű volt és 10 perces mérések után a statisztikus hiba elhanyagolható volt. A kísérleti hatáskeresztmetszet értékét a berendezésre meghatározott adatok és egyéb komponensek figyelembevételével az alábbi képlettel határoztuk meg:

$$\sigma_{\text{kis.}} = \frac{I(1+\alpha)A}{\Omega\varepsilon RmfS} \quad (46)$$

ahol I a tarrget aktivitása cps-ben α a konverziós együttható, A a tarrget tömegszáma, $\Omega\varepsilon$ a mérőberendezés geometriai tényezője, R az Avogadro szám, a a minta izotóp aránya, m a tarrget súlya, S a telítési tényező és f a primér γ -fluxus a tarrget helyén.

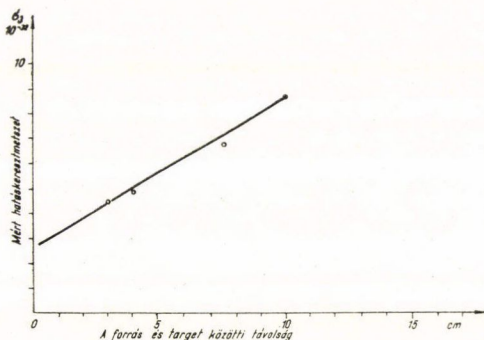
A 7. ábrán szemléltetjük a σ_2 -re a kísérletek során nyert eredményeket szén, alumínium, vas és ólom abszorbensekre. A függőleges tengelyen az abszorbensek

nélküli nullától eltérő érték a kísérletekben felhasznált sugárforrás és target hatásától származik. Ezeket a kísérleti eredményeket összehasonlítva az 5. ábrán kiszámolt elméleti értékkel, azok jó egyezést mutatnak, mind a görbék elhajlása, mind a számszerű értékek tekintetében.



7. ábra. A (γ, γ') reakció alapján különböző vastagságú szén, alumínium, vas és ólom abszorbensekkel kísérletileg meghatározott aktivációs hatáskeresztmetszetek

A 8. ábrán pedig a távolság függvényében felvett görbe látható. Az elméleti számítások alapján megbecsülhető, hogy a görbe menetére milyen befolyással van az, ha a levegőt mint közbelső szóróközeget figyelembe vesszük. Ez 10 cm-es távolságra számolva a jelenlegi hatáskeresztmetszet értékeknél 2 nagyságrenddel kisebb. Ezért ez igen jó közelítéssel azonosítható berendezésünkre σ_3 -mal, vagyis az ábrán



8. ábra. A (γ, γ') reakció alapján a sugár forrás védő falától származó kísérletileg meghatározott aktivációs hatáskeresztmetszet a forrástól levő távolság függvényében.

látható hatáskeresztmetszet növekedés a berendezésünk faláról történő szóródástól származtatható.

A σ_2 és σ_3 -ra vonatkozó kísérleti munkák végzésében *Harsányi György* elektrotechnikus volt segítségemre. Ezúton mondok köszönetet érte.

IRODALOM

- [1] G. B. Collins, B. Waldman, E. M. Stubblefield and M. Goldhaber, Phys. Rev. 55, 507-1939; 55, 1129, 1939.
- [2] E. Guth, Phys. Rev., 59, 325, 1941.
- [3] M. L. Wiedenbeck, Phys. Rev., 67, 92, 1945; 68, 1, 1945; 68, 237, 1945.
- [4] D. N. Gideon, W. C. Miller, B. W. Waldman, Phys. Rev. 75, 329/A, 1949.
- [5] H. R. Lukens, Jr. I. W. Ötvös és C. D. Wagner, JARI 11, 30, 1961.
- [6] M. Goldhaber, R. D. Hill és L. Szilárd, Phys. Rev. 55, 57, 1939.
- [7] G. Harbottle, Nucleonics, 12, 64, 1954.
- [8] N. Ikeda, K. Yoshihara, N. Mishio és K. Shimada: "Radioaktivitás (γ, γ') reakció segítségével I—IX." (japán nyelven)

Radioisotopes Vol 5 No 1, 11, 1956;
 No 2, 11, 1956;
 Vol 7 No 1, 11, 1958;
 No 1, 17, 1958;
 No 2, 92, 1958;
 No 3, 195, 1958;
 Vol 8 No 1, 17, 1958;
 No 1, 24, 1959;
 No 3, 238, 1959.

[9] *K. Yoshihara*: A kobalt-60 gamma sugarai segítségével létrehozott radioaktivitásra vonatkozó vizsgálatok I—V (japán nyelven).

Isotopes and Radiation Vol 3. No 4, 275, 1960;
No 6, 464, 1960;
No 6, 472, 1960;
Vol 4. No 2, 93, 1961;
No 2, 102, 1961.

[10] *A. Veres*: JARI 14, 123, 1963.

[11] *A. Veres*, Acta Phys. Hung. 16, 261, 1963.

[12] *A. Veres és I. Pavlicsek*: Activation of the Nuclear Isomer Indium-113m by Cobalt-60 Gamma Rays; JARI 17, 69, 1966.

[13] *A. Veres, M. Ozsgyáni*: Obnaruzsenyie izomera kadmija-113 sz pomocsjsu gamma-izlucsenyija kobalta-60 (Jagyernaja fizika, közlésre leadva).

GYORS KOINCIDENCIAKÖR ÉS IDŐFELBONTÁS*

ZÁMORI ZOLTÁN

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A cikk ismerteti a magfizikában használatos gyors koincidenziakörök időfelbontóképességének számítási és mérési módszereit.

Koincidenziaköröket a magfizikában kétféle céllal alkalmaznak. Egyrészt, hogy olyan eseményeket detektáljanak, melyek egyidőben következnek be, másrészt pedig nem egyidejű, de korrelált események időbeli eloszlásának a vizsgálatához. Az eseményeket (sugárzásokat) általában szcintillációs detektorokkal detektálják.

Azokat a koincidenziaköröket nevezik gyorsaknak, melyek időfelbontása 10^{-9} sec nagyságrendű, vagy annál jobb. Megvalósításuk nem tisztán elektronikus probléma, mivel a szcintillátorok és multiplierek időszórása is döntő szerepet játszik tervezésüknél.

A detektorból érkező jeleket általában amplitúdó és időtartamra egalizálják és olyan elektronikus áramkörbe vezetik be, amely csak akkor ad kimenő jelet, ha a beérkező két egalizált jel időben valamennyire fedi egymást. Ha a detektorok jeleit úgy formáljuk, hogy időtartamuk Δt legyen, akkor ezzel megszabtuk a koincidenziakörünk időbeli felbontóképességét, ugyanis ha a két bejövő jel között ezen Δt értéknél nagyobb idő különbség van, akkor már nem lesz fedés a jelek között, tehát nem kapunk kimenő jelet. A koincidenziakör kimenő jelet csak akkor ad, ha a két bemenő jel közötti időkülönbség kisebb, mint Δt .

Egy koincidenziakör felbontóképessége tehát durván úgy mérhető, hogy lemérjük a körre vezetett egalizált jelek hosszát. Durván azért, mert a bemenő jelek átfedési mértékének függvényében általában változik a koincidenziakörrel kivehető jelek amplitúdója és így a koincidenziakört követő számláló fokozat bemenő érzékenységtől függ az, hogy még milyen mértékű átfedésre szálal az meg.

Sokkal pontosabb felbontóképesség meghatározást tudunk végezni véletlen koincidenzia mérés alapján. Véletlenszerű egymásutánban érkező impulzusokat váltunk ki pl. egy radioaktív forrással az 1. detektorból és hasonló, de az előbbtől független impulzusokat egy másik forrással a 2. detektorból. Az impulzusokat egalizálás után a koincidenziakör két bemenetére vezetjük, s mérjük a véletlenül előálló koincidenziák időegység alatt bekövetkező N_0 számát. Mérjük ezenkívül a koincidenziakör két bemenetére érkező impulzusok N_1 és N_2 rátáját is.

Ha az első detektorba az egyik jel a t időpontban érkezett be és a második detektorba a $(t - \Delta t)$, $(t + \Delta t)$ időintervallum alatt, akkor a Δt hosszra formált jelek között még fedés lévén, a koincidenziakör ad kimenő jelet. Az első detektor minden beérkező jele tehát $2\Delta t$ ideig érzékennyé teszi a kört a második detektor

* A TMB bíráló bizottságának ösztönzésére közölt részlet a szerző kandidátusi disszertációjából [1].

1965. szept. 16.

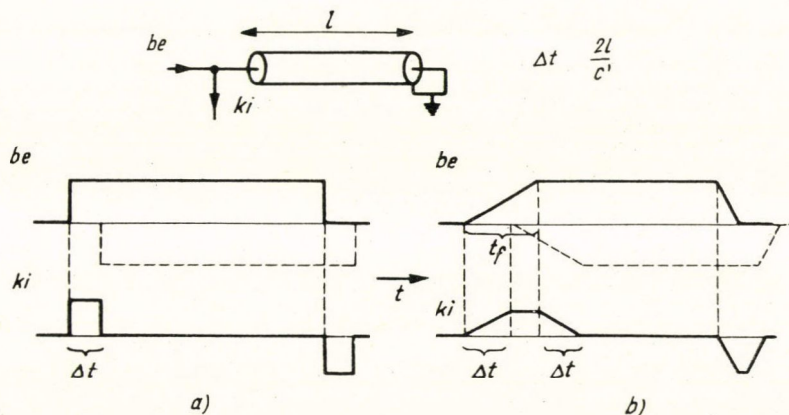
felől jövő jelekre. Ezt figyelembe véve elemi megfontolással következik, hogy

$$N_v = 2N_1N_2\Delta t. \quad (1)$$

Ezt az N_v értéket nevezik véletlen koincidencia rátának és az ebből számítható Δt értéket nevezhetnénk felbontási időnek. Meg fogjuk azonban látni, hogy sokkal jobb lesz, ha az így mért Δt értéket „koincidencia csatornaszélesség”-nek nevezzük.

Az utolsó megjegyzéstől eltekintve úgy tűnik, hogyha nagy felbontóképességű koincidenciakört kívánunk összeállítani, akkor csupán a Δt értékét kell csökkenteni. Ez végeredményben tisztán elektronikus feladat, mégpedig pontosan az, hogy a detektorokról a koincidenciakör bemenetére vezetett jeleket rövidebb időtartamra kell egalizálni és magát a koincidencia érzékelőt, tehát a koincidenciakört úgy megépíteni, hogy ne legyenek benne nagy időállandók. Ugyanis minden elektronikus kör bemenő pontjai között és kimenő pontjai között elkerülhetetlenül vannak szórt kapacitások s a beérkező jelekkel ezeket vagy fel kell tölteni, vagy ki kell sütni. Ha ezekhez a kapacitásokhoz tartozó időállandók nagyok, akkor rövid jelekkel ez nem sikerülhet.

Gyors áramkörök azonban ma már kristály diódákkal, nagy áramú csövekkel és tranzisztorokkal viszonylag könnyen szerkeszthetők. Marad tehát az impulzusok rövidre való formálásának problémája. Nagy áramú multiplier vagy limitercsövek segítségével az ezekután is elkerülhetetlen szórt kapacitások ellenére (éppen a nagy áramok miatt) előállíthatók rövid felfutású jelek. Ezekből pedig rövidre zárt mű-



1. ábra. Jelhossz egalizálás rövidrezárt kábelcsonkkal. A kábelvégről visszavert ellenkező polaritású jel $\Delta t = 2l/c'$ idő után kioltja a bemenő jelet. (A bemenetre vezetett jel csak a kétszeres Δt átfutási idő után „érzi meg”, hogy ohmikus rövidzárral találta szemben magát.) Eredmény: a Δt kétszeres jelátviteli időnek megfelelő időtartamra formált jel. A bemenő jel végének is megfelel egy ellenkező polaritású Δt hosszra formált jel. E második, a koincidenciakör kapcsolásokban zavaró jeltől elektronikus vágással szabadulnak meg. Jelölésünkben l a kábel hossza, c' az elektromos jel futási sebessége az alkalmazott kábelben. Ez utóbbi értéke a koaxiális kábelekben alkalmazott dielektrikumok elektromos jellemzőitől függően a fénysebesség ($3 \cdot 10^{10}$ cm sec⁻¹) 70–90%-a.

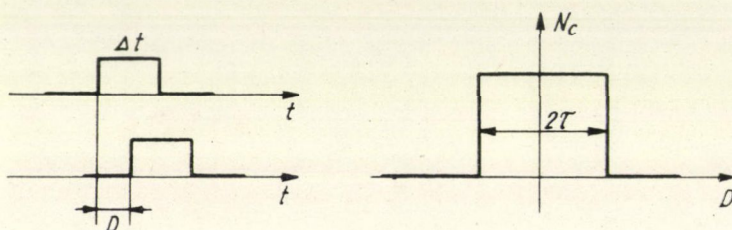
a) A jelformálás hatása rövid felfutású bemenő jel esetén. (A formált jel Δt hosszú.)

b) Rövidrezárt kábelcsonkkal történő jelformálás hatása véges t_f felfutási idejű bemenőjel esetén. A formált jel most $\Delta t + t_f$ hosszúságú, amplitúdója pedig nem éri el a bemenőjel amplitúdóját ha $\Delta t < t_f$. Ilyen esetben a formált jel hossza Δt csökkentésével a t_f felfutási időhöz tart, miközben amplitúdója a 0 érték felé csökken.

vonalakkal, kábelekkal vagy impulzus transzformátorokkal könnyen formálhatók a felfutási idő értékénél nem rövidebb jelek. (1. ábra.) Sőt, ha itt szigorúbb követelmények lennének, az ún. differenciál koincidenziakörökkel [2] még mindig megvalósíthatók lehetnének elektronikus módszerekkel szinte tetszőleges rövidségű Δt értékek.

A most következő részletesebb analízisből azonban ki fog derülni, hogy a Δt koincidenziacsatornaszélesség csökkentésével — amely ugyan a (1) formulán keresztül a véletlen koincidenziaszámot tetszőlegesen lenyomhatja — a koincidenziakör ezentúl τ -val jelölt felbontóképessége — tehát az az időtartam, amelynél nagyobb időkülönbséggel beérkező eseményeket a kör feltétlenül, vagy legalábbis megadott valószínűséggel visszatart — nem csökkenthető.

Hogy erről meggyőződjünk, először röviden fel kell idéznünk a koincidenzia felbontási idő mérésének tulajdonképpen egyedül helyes módszerét, a késleltetett koincidenzia módszert. Ennél az eljárásnál az egy-időben érkező események által a detektorokból kiváltott két Δt hosszra formált jelet — valamelyik ágban egy D idejű



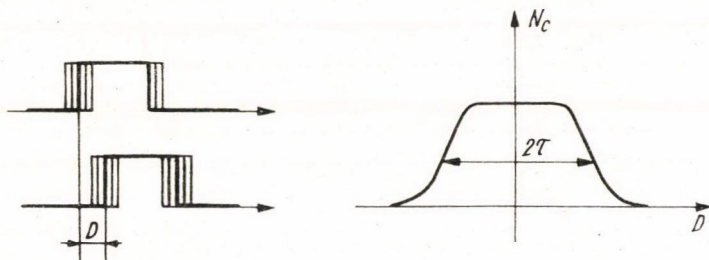
2. ábra.

késleltetést végezve — vezetjük a koincidenziakörre. Ha az egyidejű detektált események időegység alatti száma N_c , úgy a D késleltetési idő változtatásával a 2. ábrán látható késleltetett koincidenzia görbét vehetjük fel — feltéve, hogy az egyidejű események a két detektorban egyidejű jeleket váltanak ki. Ennek a görbének a félszélessége lesz definíció szerint a felbontási idő, hiszen a $D > \tau$ értéknél nagyobb időkülönbséggel érkező jelekre tényleg nem reagál a kör. Ebben az esetben — mikor tehát az egyidejű eseményektől származó jelek a mesterséges D késleltetés előtt maguk is feltétlenül egyidejűek voltak — az ábrából is leolvashatóan $\tau = \Delta t$.

Ha azonban a detektorról levett Δt hosszra formált jelek (pl. kezdőpontjaik) az őket kiváltó eseményekhez képest időben ingadozhatnak — és ez a helyzet minden részecske-detektornál —, akkor a késleltetett koincidenziagörbe négyzetes alakja eltorzul és a szélessége is megváltozhat. (3. ábra.) Ha a detektor jelek megjelenési időpontjának szórása σ , és $\sigma \gg \Delta t$, azaz nagyobb a detektorból kijövő jelek időszórása, mint az elektronikus úton tetszőlegesen rövidre megválasztható Δt formálási hossz (azaz a koincidenzia csatornaszélesség), akkor a késleltetett koincidenzia görbe négyzetes alakja egészen eltorzul és τ félszélessége (félmagasságban), amelyet definíció szerint ezután is koincidenzia felbontóképességnek (vagy időnek) nevezünk, nagyobb lesz, mint Δt .

Valóban különbséget kell tehát tennünk a véletlen koincidenziákkal mérhető Δt koincidenzia csatornaszélesség és a késleltetett koincidenzia görbe szélességből meghatározott τ koincidenzia felbontási idő között. τ nagysága a σ időszórással

van szoros kapcsolatban. Ha az időszórás nagy, hiába rövid a formálási idő, a Δt -nél nagyobb időkülönbséggel érkező részecskék is adhatnak koincidencia jelet. Hogy még milyen távoli jelek, arra a fenti mérésből kiolvasott τ érték adhat információt.



3. ábra.

Milyen kapcsolat van σ és τ között? Ez a detektorjelek időingadozásainak eloszlásfüggvényétől függ. Legyen egy olyan példánk, amelyben az egyidejű eseményeknek megfelelő detektorjelek szórásait mindkét detektor után az analitikusan viszonylag könnyen kezelhető Gauss eloszlások írják le.

$$w(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(t-i)^2}{2\sigma^2}}. \quad (2)$$

Válasszuk i -ot mindkét detektornál 0-nak, így

$$w_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} \quad (3)$$

s ha az első detektorból kijövő jeleket késleltetjük meg D idővel

$$w_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(t-D)^2}{2\sigma^2}} \quad (4)$$

feltételezve, hogy mindkét detektor időszórása ugyanaz a σ érték.

Határozzuk meg ilyen eloszlásfüggvények esetén a késleltetett koincidencia görbét leíró $N_c = C(D)$ összefüggést.

Annak a valószínűsége, hogy az 1. detektor jele a t időpont körüli dt intervallumba jöjjön be $w_1(t)dt$. Hogy a 2. detektor jele a t körüli $\pm \Delta t$ intervallumba jöjjön be, annak a valószínűsége Δt jelformálási hossz esetén.

$$\int_{-\Delta t}^{\Delta t} w_2(t-t') dt'.$$

A két esemény egyidejű bekövetkezésének

$$w_1(t) dt \int_{-\Delta t}^{\Delta t} w_2(t-t') dt'$$

valószínűsége megadja a koincidencia bekövetkezésének valószínűségét azzal a feltétellel, hogy az első jel a t időpontban érkezett be. A fenti valószínűségi sűrűségfüggvényt t szerint integrálva megkapjuk annak a valószínűségét, hogy a koincidencia egyáltalán bekövetkezen.

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\Delta t}^{\Delta t} w_1(t) w_2(t-t') dt' dt.$$

Ez tehát a valószínűsége annak, hogy az egyidejű események által kiváltott, az egyik ágba D idővel mesterségesen megkésleltetett és ezen túlmenően a jelkiváltás statisztikus természete miatt időben (a $w_1(t)$ és $w_2(t)$ valószínűségi sűrűségfüggvényekkel leírt módon) ingadozó jelek egy Δt koincidencia csatornaszélességű körben koincidienciát adjanak.

Béírva ide $w_1(t)$, és $w_2(t)$ (4) és (3) alakját, a kitevőkbeni teljes négyzetté alakítás

$$\begin{aligned} C(D) &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\Delta t}^{\Delta t} \exp \left[-\frac{2t^2 - 2t(D+t') + D^2 + t'^2}{2\sigma^2} \right] dt' dt \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\Delta t}^{\Delta t} \exp \left[-\frac{(D-t')^2}{4\sigma^2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{\left(\sqrt{2}t - \frac{D+t'}{\sqrt{2}} \right)^2}{2\sigma^2} \right] dt dt' \end{aligned}$$

és integrálás után azt kapjuk, hogy

$$C(D; \Delta t, \sigma) = \frac{1}{2} \left[\Phi \left(\frac{D+\Delta t}{\sqrt{2}\sigma} \right) - \Phi \left(\frac{D-\Delta t}{\sqrt{2}\sigma} \right) \right], \quad (5)$$

ahol $\Phi(x)$ a szokásos Gauss integrál:

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x e^{-\frac{\varphi^2}{2}} d\varphi.$$

Ez az összefüggés írja le a késleltetett koincidencia görbe alakját a D késleltetési idő függvényében. Adott időszórás, de különböző Δt koincidencia csatornaszélesség mellett ezen összefüggés segítségével felrajzolt görbesereg a 4. ábrán látható.

Ezen függvények megszerkesztése két egymástól $2\Delta t$ értékre eltolt és $\sqrt{2}\sigma$ szórással jellemzett Gauss-integrál értékének leolvasott különéből egyszerűen történhet. $\Delta t \ll \sigma$ esetén a $C(D)$ függvény alig tér el egy $\sqrt{2}\sigma$ szórással jellemzett Gauss görbétől, amelynek a félmagasságban vett τ félszélessége egyszerű számítással

$$\tau = \sqrt{2 \ln 2} \cdot \sqrt{2}\sigma = 1,66\sigma, \quad (6)$$

vagy a gyakran használt 2τ érték

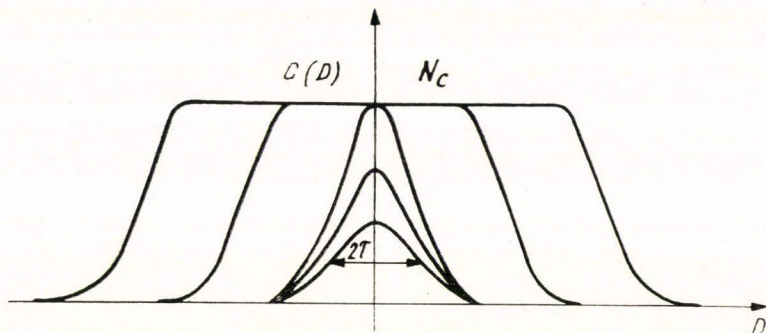
$$2\tau = 3,32\sigma. \quad (7)$$

Megjegyzendő, hogy $D=0$ esetén az (5.) összefüggés a koincidencia hatásfokot adja meg az adott σ és Δt értékek esetére.

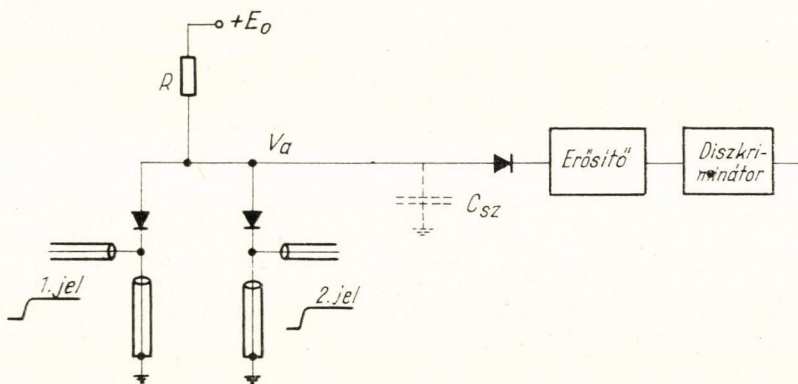
Megvan tehát a kapcsolatunk $\Delta t \ll \sigma$ esetén is a τ felbontóképesség és a detektor jelek σ időszórása között. Ha $\Delta t \gg \sigma$, akkor $\tau = \Delta t$, amint azt szemléletesen is beláthatjuk.

Fennmarad még a kérdés, hogy szcintillációs detektorok esetén milyen nagyok a σ -val jellemzett időszórások. Ha ezt számolni tudnánk, akkor a τ koincidencia felbontási időt előre tervezhetnénk.

Először azonban nézzük meg az általunk használt koincidencia kör kapcsolását (5. ábra).



4. ábra. Az (5.) egyenlettel leírt függvény grafikus képe. A görbe sereg paramétere a Δt koincidencia csatorna-szélesség.



5. ábra. A diódás koincidenziakör kapcsolási rajza.

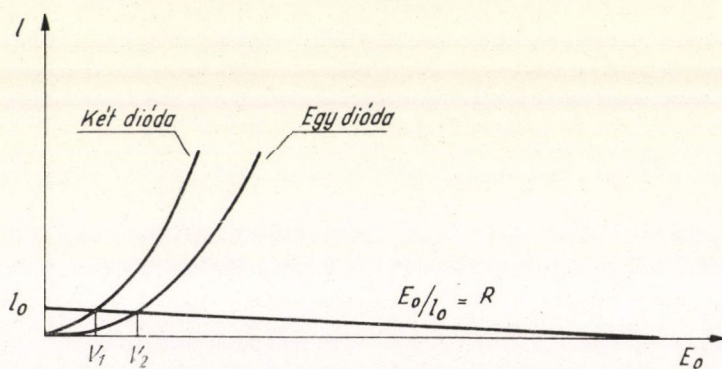
A multiplier anódjáról érkező negatív jelekkel nagy meredekségű nyitott csöveket zártunk le, s ezzel amplitúdóban limitáltuk a jeleket. Limiterként két párhuzamosan kapcsolt E 180 F csövet használtunk, melyek előfeszültségét úgy állítottuk be, hogy együttes anódáramuk 30 mA legyen. Mivel ezeknek a csöveknek a meredeksége $S = 15 \text{ mA/V}$, így 1 V-os negatív jel elegendő a lezárásukra. A limiterfokozat anódján megjelenő pozitív jeleket 150 ohmos hullámellenállású 80 cm

hosszú rövidre zárt kábelcsonkkal egalizáltuk időben. Így a Δt formálási idő értéke eredetileg ~ 7 nsec. Mivel a rövidre zárt kábelvégről jelek verődnek vissza, a limitercsővek anódellenállása a hullámellenállással egyenlőnek lett választva (150 ohm). Így a limitercső 75 ohmos munkaellenállást érez, melyen a 30 mA 2,25 V-os feszültségimpulzusokat produkál. Ezeket az egalizált jeleket vezettük egy diódás Rossi-körbe, melynek anódjáról egy diódás nyújtó fokozaton keresztül csatlakoztunk egy erősítőre. Ezután egy integrál diszkriminátor és számláló fokozat következett.

A diódás koincidenciakör működési elve hasonló Rossi eredeti csöves kapcsolásához. Ez a diódás kapcsolat a két bemenőjel közül a kisebbikkel arányos kimenőjelet ad ki. Így ha az egyik bemeneten nincs jel, akkor elvileg a kimeneten sincs.

Nyugalmi állapotban a diódák vezetnek, a munkaellenállás alsó végén, tehát a C_{sz} szórt kapacitáson, a dióda karakterisztikákból meghatározhatóan V_1 ($\sim 0,1$ V) a feszültség (6. ábra). Ha az egyik oldalra érkezik be jel, akkor az anódpont feszültsége — szintén a karakterisztikából leolvasható — V_2 értékig növekedhet. Ha egyidejűleg a másik oldalra is érkezik be impulzus, akkor mindkét dióda lezár és a C_{sz} kapacitás az R ellenálláson — ha elég hosszú az átfedési idő — a V_{be} feszültség-szintig töltődhet. Ezt a feszültséget V_a nem haladhatja meg, mivel a diódák ekkor már kinyílnak.

Az időszórásokra visszatérve — ez a szcintillációs detektoroknál két tényezőtől függ. A foszforban a sugárzással való gerjesztést követően kilépő fotonok megjelenési idejében van egyrészt bizonytalanság, másrészt a multiplierben a fotonok által kiváltott elektronlavina beérkezési idejében.



6. ábra. A diódás koincidenciakör működésének grafikus szemléltetése.

Ha a multiplier fotokatódjáról egy elektron indul el, akkor az anódra beérkező elektronlavina időbeli eloszlása jó közelítéssel Gauss-szerű lesz. Legyen ennek az időbeli töltéseloszlásnak az anódra való átlagos beérkezési ideje t_0 , szórása pedig β . A β időszórás értéke jobb multiplier csöveknél 1 nsec körül van. Ennek ismeretében felírható az 1 elektron hatására az anódon megjelenő áram időfüggése. (7. ábra)

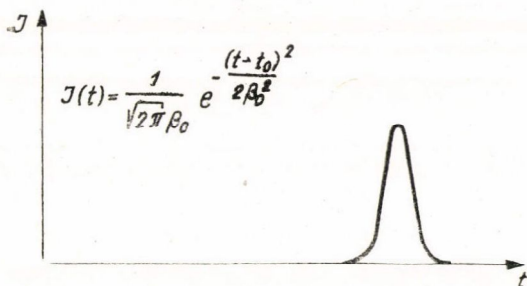
$$I(t) = \frac{Me}{\sqrt{2\pi}\beta} e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\beta^2}}, \quad (8)$$

ahol e az elektron töltése, M pedig a multiplier sokszorozási tényezője. Ha pl. $\beta = 1$ nsec és $M = 10^8$ amint ez jobb multiplier csöveknél (pl. RCA 6810/A) kb. igaz, akkor a t_0 időpontban folyó maximális áram

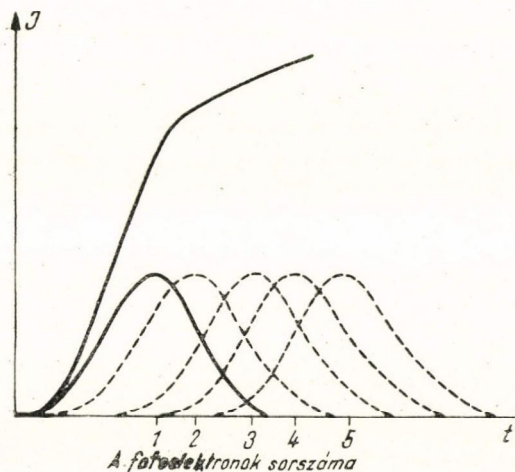
$$I_{\max} \simeq \frac{10^8 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{2,5 \cdot 10^{-9}} \simeq 0,64 \cdot 10^{-2} \text{ Amp.}$$

A multiplier anódon levő $R_a = 150$ ohmos ellenálláson (ha az anódköri időállandó nem nagyobb mint β) ez

$$V_{\max} = R_a I_{\max} \simeq 1 \text{ Volt}$$



7. ábra. A multiplier jelátfutási idejének eloszlása.



8. ábra. Egy szcintillációs esemény hatására a multiplier anódon megjelenő áram kialakulása. A katódról gyors egymásutánban kiváltott fotoelektronokhoz tartozó elemi áram impulzusok szuperpozíciójaként adódik ki a teljes anódáram.

feszültséget hoz létre. Ez az 1 V, ami egyetlen fotoelektron hatására alakult ki, egy pillanatra már éppen le képes zárni a limitercsövet. Gyors egymásutánban érkező két fotoelektron pedig — M és β ilyen értéke mellett — biztosan lezárja azt. (8. ábra)

Szcintillációs számlálónál egy detektált esemény hatására is általában több fotoelektron indul el a katódról, s még a lassú lecsengésű NaJ esetén is viszonylag rövid időközökben. A NaJ(Tl) foszfor lumineszcenciájának lecsengési ideje $0,25 \mu\text{sec}$, az időegységre eső bomlási valószínűség tehát $\lambda = 4 \cdot 10^6 \text{ sec}^{-1}$. Legyen egy adott energiájú részecske hatására a katódból kiváltott fotoelektronok száma R . Ekkor megbecsülhetjük, hogy a fotoelektronoknak a katódból való átlagos kilépési időköze $1/R\lambda$ nagyságú, aminek értéke pl. $R = 500$ mellett ($0,5 \text{ MeV}$ -es annihilációs fotonok NaJ foszforban) $0,5 \cdot 10^{-9} \text{ sec}$. A multiplier anódfeszültségének alakulása ilyen körülmények között tehát a 8. ábrán vázolt görbéhez hasonló.

Mitől fog ingadozni a limiter lezárási ideje? Egyrészt a fotoelektronok megjelenési idejében mutatózó bizonytalanságtól, másrészt a multiplieren való t_0 átfutási időben fellelhető bizonytalanságtól. Jellemezze az előbbi eloszlását σ_1 , az utóbbit σ_2 szórás. Így a detektorjel megjelenési

idejét jellemző már említett σ eredő szórásra felírható,

$$\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2. \quad (9)$$

A σ_2 szórás értéke szférikus fotokatóddal készült gyors multipliereknél (RCA 6810—A, 56 AVP) kisebb, mint $0,5 \cdot 10^{-9}$ sec.

σ_1 értékére az exponenciális lecsengésű foszforok statisztikus elemzése alapján Minton [3] vezetett le egy összefüggést. Számításai szerint az R és λ értékekkel jellemzett szcintillációs folyamatnál a Q -adik fotoelektron átlagos megjelenési ideje

$$\bar{t} = \frac{Q}{R\lambda} \left[1 + \frac{Q+1}{2R} + \dots \right] \quad (10)$$

és a Q -adik fotoelektron kiváltásának idejében mutatkozó időszórás

$$\sigma_1^{(Q)} = \frac{Q^{1/2}}{R\lambda} \left[1 + \frac{2(Q+1)}{R} + \dots \right]^{1/2}. \quad (11)$$

Ha a limiter fokozatunk már az első fotoelektron hatására lezárul, úgy $Q=1$ esetén az utóbbi képletből ($R=500$, $\lambda=4 \cdot 10^6 \text{ sec}^{-1}$.) $\sigma_1^{(1)}=0,5 \cdot 10^{-9}$ sec, s ilyenkor a detektor jeleiben mutatkozó teljes σ szórás értéke

$$\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} =$$

$$= \sqrt{2} \cdot 0,5 \cdot 10^{-9} = 0,7 \cdot 10^{-9} \text{ sec}$$

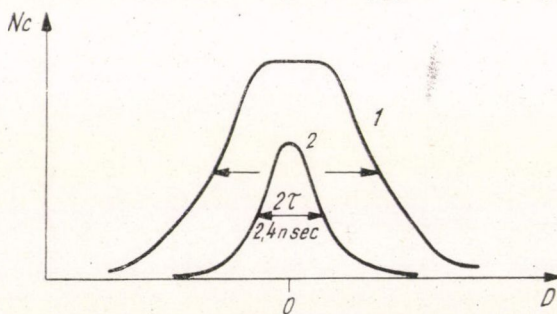
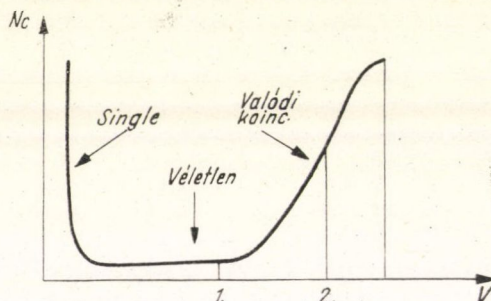
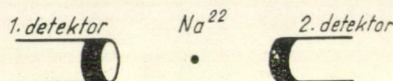
s az ennek megfelelő τ felbontóképesség (7) alapján (feltételezve, hogy az időingadozások Gauss-szerűek)

$$2\tau \approx 2,3 \text{ nsec.}$$

Na^{22} -ből származó pozitronok megsemmisülési sugárzásával mi $2\tau=2,4$ nsec értéket mértünk, tehát a lassú NaJ foszforral elérhető alsó elvi határt tulajdonképpen elértük.

Ezt a határt a koincidenciakör esetleges módosításával elektronikus úton csökkenteni nem lehet. A csökkentés egyetlen módja gyorsabb lecsengésű foszforok illetve kisebb átfutási időszórású multiplierek alkalmazása.

(A helyzet teljesen analóg a sugárzásdetektorok energiatelbontóképességével. Ott sem az elektronikus amplitúdó analízátorok tetszőlegesen csökkenthető csatornaszélessége, hanem a detektorban kiváltott jelek amplitúdó szórása határozza meg az



9. ábra. Mérési eredmények. a) A gyors koincidencia kimenetről származó jelek amplitúdó spektruma. b) A két különböző V_D diszkriminációs feszültség mellett mért késleltetett koincidencia görbe.

energiafelbontóképességet. Az analógia annyira teljes, hogy energiaspektrum mérésénél az egycsatornás differenciáldiszkriminátorral felvett vonal alakját az alkalmazott csatornaszélesség függvényében — Gauss-eloszlású amplitúdó szórását feltételezve — ugyancsak a (5) formula adja meg. A bevezetett „koincideniacsatornaszélesség” elnevezés erre az analógiára utal.)

Mérési eredményeink a 9. ábrán láthatók.

Az ábra felső sarkában a gyorskoincideniacsatorna erősítőjéről levett jelek amplitúdó spektrumát rajzoltuk fel. Ez nyilvánvalóan egy féloldalas Gauss-görbe, ha ugyanis a limiter után 7 nsec hosszúságra formált jelek éppen maximálisan fedik egymást, akkor lesz a C_{sz} kapacitás V_a feszültsége maximális. (Ezzel a feszültséggel arányos a kimenőjel). Ha a formált jelek akár egyik, akár másik irányban szórnak, a jelek közötti átfedés csak kisebb lehet. Ha a V_D diszkriminátor feszültséggel csak az „egyes” (single) impulzusoknak megfelelő jeleket vágjuk le, akkor lesz az effektív Δt koincideniacsatornaszélesség a kábel formálással beállított 7 nsec körüli érték. (Pontos értéke az alkalmazott diszkrimináció miatt véletlen koincidenacia módszerrel határozható meg.) Ha a diszkriminációs szintet növeljük, akkor az effektív Δt koincideniacsatornaszélesség éppenúgy csökken, mint ha rövidebb vágó kábelt használtunk volna, mert ilyenkor a kisebb átfedések nyomán megjelenő kimenő impulzusokat a diszkriminátor visszatartja.

Ha a V_D diszkriminátor szint már beér a prompt koincidenaciáknak megfelelő Gauss-görbe területére, úgy a felbontás már csak pár százalékot javulva — a $2\tau = 3,32\sigma$ értékhez tart, viszont a koincidenacia határfok — a V_D szint felett megmaradó területtel arányosan — rohamosan romlik.

A 9. ábra alsó részén a fent bejelölt két V_D érték mellett felvett késleltetett koincidenacia görbéket látjuk.

A görbék menetét a (5) formula valóban visszaadja, levezetésekor tett feltételezéseink tehát reálisnak bizonyulnak.

IRODALOM

- [1] Zámori Z.: Szögkorreláció és izomérhatáskeresztmetszet viszony mérés neutron-gamma reakciókban. Kandidátusi értekezés. Budapest, 1963.
- [2] Bay Z.: Nucleonics 14 IV. 56, 1956.
- [3] Minton G. H.: J. Res. Nat. Bur. Stand. 57, 119, 1956.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A KVANTUMMECHANIKA ALAPEGYENLETEI*

P. A. M. DIRAC

1. Bevezetés

Amint az jól ismert, az atomfizika kísérleti tényei szükségessé teszik, hogy az atomi jelenségek leírásában eltérjünk az elektrodinamika klasszikus elméletétől. Ez az eltérés *Bohr* elméletében az atom sugárzástól mentes, stacionárius állapotainak létezésére, és a stacionárius állapotokat s az ezek között végbemenő átmenetek során kibocsátott sugárzás rezgésszámaikat rögzítő szabályokra, az ún. kvantumfeltevételekre vonatkozó feltevések alakját ölti. Ezek a szabályok teljesen idegenek a klasszikus elmélettől, de az atomi jelenségek korlátozott körének értelmezésében igen sikeresnek bizonyultak. A klasszikus elmélet csak azon a feltevésen keresztül kerül felhasználásra, mely szerint a stacionárius állapotokban a mozgások leírására a klasszikus törvények érvényesek, bár érvényüket az átmenetek folyamán teljesen elveszítik, valamint a *korrespondencia-elv*nek nevezett feltevésen keresztül, mely szerint a klasszikus elmélet a helyes eredményt adja abban a határesetben, amikor a rendszer egy periódusára vonatkoztatott hatás nagy a h Planck-állandóhoz képest, és bizonyos más speciális esetekben.

Nemrég közölt dolgozatában [1] *Heisenberg* új elméletet javasol. *Heisenberg* dolgozata azt sugalmazza, hogy nem a klasszikus mechanika egyenleteiben van valamilyen hiba, hanem azokat a matematikai operációkat kell módosítanunk, amelyek segítségével a fizikai eredményeket levezetjük belőlük. Az új elméletben tehát a klasszikus elmélet szolgáltatta minden információ felhasználható.

2. Kvantumalgebra

Vegyük szemügyre egy többszörösen periodikus nemelfajult u szabadsági fokú dinamikai rendszert, melyet a koordináták és időderiváltjaik között kapcsolatot teremtő egyenletek határoznak meg. A feladatot a klasszikus elméletben a következőképpen oldhatjuk meg. Tegyük fel, hogy az x koordináták mindegyike a t időben többszörös Fourier-sorba fejthető, azaz

$$x = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_u} x(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_u) \exp i(\alpha_1 \omega_1 + \alpha_2 \omega_2 + \dots + \alpha_u \omega_u) t,$$

vagy rövidebb jelöléssel

$$x = \sum x_\alpha \exp i(\alpha \omega) t.$$

Helyettesítsük be ezeket a kifejezéseket a mozgásegyenletekbe, és tegyük egyenlővé az egyenletek két oldalán minden egyes harmonikus tag együtthatóit. Az így nyert egyenletek (nevezzük ezeket az A egyenleteknek) meghatározzák az x_α amplitúdók

* Proc. Roy. Soc. 109, 642 (1925).

mindegyikét és az $(\alpha\omega)$ rezgésszámokat (a rezgésszámokat radián per időegységben mérjük). A megoldás nem lesz egyértelmű. A megoldások u -szorosan végtelen seregét nyerjük; a megoldások oly módon jellemezhetők, hogy az amplitúdókat és a rezgésszámokat u számú állandó: $\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_u$ függvényének tekintjük. Most tehát minden egyes x_α és $(\alpha\omega)$ két számsorozattól függ, az α -któl és a κ -któl. Jelölésük így történhet: $x_{\alpha\kappa}, (\alpha\omega)_\kappa$.

A feladat kvantumelméleti megoldását keresve *Heisenberg* nyomán most is feltesszük, hogy mindegyik koordináta $\exp i\omega t$ alakú harmonikus komponensekkel reprezentálható; ezek amplitúdói és frekvenciái két számsorozattól függenek, melyek jele legyen $n_1 \dots n_u$ és $m_1 \dots m_u$. Itt az n -ek és az m -ek mind egész számok; az amplitúdókat és a frekvenciákat így írjuk: $x(nm), \omega(nm)$. Az $n_r - m_r$ különbségek a korábbi α_r -eknek felelnek meg, azt a szerepet azonban, amelyet előzőleg a κ -k játszottak megjelölve, hogy az egyes harmonikus komponensek melyik megoldáshoz tartoznak, sem az n -ek, sem pedig az n -eknek és az m -eknek valamiféle függvényei nem töltik be. Nem foglalhatjuk össze pl. mindazon komponenseket, amelyekre az n -ek adott értékrendszerrel egyeznek meg mondván, hogy ezek önmagukban a mozgásegyenletek egy teljes megoldását alkotják. A kvantumelméleti megoldások egymáshoz kapcsolódnak és egyetlen egésznek tekintendők. Ennek az a következménye matematikailag, hogy míg a klasszikus elméletben az A egyenletek mindegyike a κ -k adott értékrendszeréhez tartozó amplitúdók és frekvenciák között ad meg összefüggést, a kvantumelméleti A egyenletekben előforduló amplitúdókhoz és frekvenciákhoz nem tartozik az n -eknek, vagy pedig az n -ek és az m -ek valamilyen függvényeinek meghatározott értékrendszere; mindazonáltal, mint később látni fogjuk, n -jeik és m -jeik egymással speciális kapcsolatban állanak.

A klasszikus elméletben fennáll a nyilvánvaló

$$(\alpha\omega)_\kappa + (\beta\omega)_\kappa = (\alpha + \beta, \omega)_\kappa$$

összefüggés.

*Heisenberg*et követve feltesszük, hogy a megfelelő összefüggés a kvantumelméletben

$$\omega(n, n - \alpha) + \omega(n - \alpha, n - \alpha - \beta) = \omega(n, n - \alpha - \beta)$$

vagy

$$\omega(nm) + \omega(mk) = \omega(nk). \quad (1)$$

Ez azt jelenti, hogy $\omega(nm)$ előállítható az $\Omega(n) - \Omega(m)$ alakban, ahol az Ω -k a frekvenciaszintek. *Bohr* elméletében ezek az energiaszintek $2\pi/h$ szorosaival volnának, ezt azonban nem kell feltennünk.

A klasszikus elméletben a κ -k ugyanazon értékrendszeréhez tartozó két harmonikus komponenst a következőképpen szorozhatunk össze:

$$a_{\alpha\kappa} \exp i(\alpha\omega)_\kappa t \cdot b_{\beta\kappa} \exp i(\beta\omega)_\kappa t = (ab)_{\alpha+\beta, \kappa} \exp i(\alpha + \beta, \omega)_\kappa t,$$

ahol

$$(ab)_{\alpha+\beta, \kappa} = a_{\alpha\kappa} b_{\beta\kappa}.$$

A kvantumelméletben ennek megfelelően egy (nm) és egy (mk) komponenst szorozhatunk össze:

$$a(nm) \exp i\omega(nm)t \cdot b(mk) \exp i\omega(mk)t = ab(nk) \exp i\omega(nk)t,$$

ahol

$$ab(nk) = a(nm)b(mk).$$

Megfontolásaink arra az eredményre vezettek tehát, hogy egy (nm) és egy (mk) komponens amplitúdójának szorzatát egy (nk) amplitúdójának kell tekintenünk. Ez, azzal a szabállyal együtt, hogy egy A egyenletben csak az ugyanazon értékrendszer-párhoz tartozó amplitúdók adhatók össze, foglalja el a klasszikus szabály helyét, mely szerint az egy A egyenletben előforduló valamennyi amplitúdó a κ -k ugyanazon értékrendszeréhez tartozik.

Most már abban a helyzetben vagyunk, hogy a kvantumváltozókon a közönséges algebrai műveleteket elvégezhetjük. Az x és y változók összegét az

$$\{x + y\}(nm) = x(nm) + y(nm)$$

egyenlet határozza meg, szorzatukat pedig

$$xy(nm) = \sum_k x(nk)y(km), \quad (2)$$

mely hasonlít a klasszikus szorzat

$$(xy)_{\alpha\kappa} = \sum_r x_{r\kappa}y_{\alpha-r,\kappa}$$

képletére.

Itt a kétféle algebra között fontos eltérés lép fel. Általában

$$xy(nm) \neq yx(nm),$$

azaz a kvantumelméleti szorzás nem kommutatív, noha — mint arról könnyen meggyőződhetünk — az asszociativitás és a disztributivitás fennáll. A (2) alatt definiált $xy(nm)$ komponensekkel rendelkező mennyiséget x és y Heisenberg-szorzatának nevezzük, és jelölésére egyszerűen xy -t írunk. Valahányszor két kvantum-mennyiség szorzata fellép, azon a Heisenberg-szorzatot kell érteni. Természetesen az n -ek explicite rögzített értékrendszereihez tartozó amplitúdók, frekvenciák és más mennyiségek szorzása esetében a közönséges szorzás értendő.

Az x kvantummennyiség reciproka az

$$1/x \cdot x = 1 \quad \text{vagy} \quad x \cdot 1/x = 1 \quad (3)$$

összefüggések bármelyikével definiálható. Ez a két egyenlet egyenértékű, ha az $1/x$ -is az előbbi mindkét oldalát előlről szorozzuk x -szel, majd hátulról x -szel osztjuk, az utóbbit kapjuk meg. Hasonlóképpen x négyzetgyöke a

$$\sqrt{x} \cdot \sqrt{x} = x \quad (4)$$

összefüggéssel definiálható. Nem nyilvánvaló, hogy (3)-nak és (4)-nek mindenkor létezik megoldása. Speciálisan ahhoz, hogy kifejezhessük \sqrt{x} -et, szükség lehet al-harmonikusok, azaz új közbenső frekvenciaszintek bevezetésére. Ezek a nehézségek úgy kerülhetők el, hogy mielőtt áttérnénk a kvantumelméleti értelmezésre és leszámraztatnánk az A egyenleteket, minden egyenletet racionális alakra hozunk és eltüntetjük a nevezőket.

Immár képesek vagyunk rá, hogy a rendszer valamennyi mozgásegyenletét átvegyük a kvantumelméletbe feltéve, hogy el tudjuk dönteni, mi a tényezők helyes sorrendje az egyes szorzatokban. Minden olyan egyenlet, amely a mozgásegyenletekből a szorzatok tényezőinek sorrendjét változtatlanul megőrző algebrai el-

járással, valamint a t idő szerint elvégzett differenciálással nyerhető, ugyancsak átvehető a kvantumelméletbe. Így speciálisan átvehető az energiatétel.

A mozgásegyenletek nem elégségesek ahhoz, hogy a kvantumproblémát megoldjuk. A klasszikus elméletben a mozgásegyenletek mindaddig nem határozzák meg az x_{α} -kat és $(\alpha\omega)_{\alpha}$ -kat mint a α -k függvényeit, amíg nem vezetünk be valamely feltevést a α -kra vonatkozóan, amely azokat meghatározza. Ha úgy tetszenék, a megoldás teljessé tétele érdekében megválaszthatnánk a α -kat oly módon, hogy $\partial E/\partial \alpha_r = \omega_r/2\pi$ teljesüljön, ahol E a rendszer energiája; így a α_r -ek a J_r hatás-változókkal egyeznének meg. A kvantumelméletben is kell ezeknek megfelelő egyenleteknek lenniök. Ezek lesznek a kvantumfeltételek.

3. Kvantumdifferenciálás

Az egyetlen differenciálás, amelyet eddig a kvantumelméletben alkalmaztunk, a t idő szerint elvégzett differenciálás volt. Most meghatározzuk azon legáltalánosabb d/dv kvantumoperáció alakját, amelyre teljesül a

$$\frac{d}{dv}(x+y) = \frac{d}{dv}x + \frac{d}{dv}y \quad (I)$$

és a

$$\frac{d}{dv}(xy) = \frac{d}{dv}x \cdot y + x \cdot \frac{d}{dv}y \quad (II)$$

törvény. (Megjegyezzük, hogy az utóbbi egyenletben x és y sorrendje érintetlen marad.)

Ezen törvények közül az első megköveteli, hogy dx/dv komponenseinek amplitúdói x komponenseinek amplitúdóitól lineárisan függjenek, azaz hogy

$$dx/dv(nm) = \sum_{nm} a(nm; n'm')x(n'm') \quad (5)$$

1 egyen. Az egész számok alkotta n, m, n' és m' értékrendszer-négyes mindegyikéhez egy-egy $a(nm; n'm')$ együttható tartozik. A második törvény feltételeket ró ki az a -kra. Helyettesítsük be a II-be szereplő differenciálhányadosok helyére azok (5) alatt megadott kifejezését, mindkét oldalon írva az (nm) komponenseket. Az eredmény:

$$\begin{aligned} \sum_{n'm'k} a(nm; n'm')x(n'k)y(km') &= \sum_{kn'k'} a(nk; n'k')x(n'k')y(km) + \\ &+ \sum_{kk'm} x(nk)a(km; k'm')y(k'm'). \end{aligned}$$

Ennek igaznak kell lennie x és y amplitúdóinak minden értékére, így tehát egyenlővé tehetjük $x(n'k)y(k'm')$ -nek az egyenlet két oldalán szereplő együtthatóit. Felhasználva a δ_{mn} szimbólumot, melynek értéke egységnyi, ha $m=n$ (azaz ha $m_r=n_r$ minden r -re), és zérus, ha $m \neq n$, kapjuk:

$$\delta_{kk'}a(nm; n'm') = \delta_{mm'}a(nk'; n'k) + \delta_{nn'}a(km; k'm').$$

A továbbiakban egyébként szemügyre kell vennünk a kk', mm' és nn' értékrendszerek között fennálló egyenlőségek és egyenlőtlenségek különféle eseteit.

Legyen először $k = k'$, $m \neq m'$, $n \neq n'$. Ekkor

$$a(nm; n'm') = 0$$

adódik. Eszerint minden $a(nm; n'm')$ eltűnik, kivéve ha $n = n'$ vagy $m = m'$ (vagy ha mindkét egyenlőség teljesül). A $k \neq k'$, $m = m'$, $n \neq n'$ és $k \neq k'$, $m \neq m'$, $n = n'$ esetek nem adhatnak semmi újat. Vegyük szemügyre most a $k = k'$, $m = m'$, $n \neq n'$ esetet. Most

$$a(nm; n'm) = a(nk; n'k)$$

adódik. Eszerint $a(nm; n'm)$ független m -től feltéve, hogy $n \neq n'$. Hasonlóképpen a $k = k'$, $m \neq m'$, $n = n'$ esetben azt kapjuk, hogy $a(nm; nm')$ független n -től feltéve, hogy $m \neq m'$. A $k \neq k'$, $m = m'$, $n = n'$ esetben kapjuk:

$$a(nk'; nk) + a(km; k'm) = 0.$$

Ezek az eredmények így foglalhatók össze:

$$a(nk'; nk) = a(kk') = -a(km; k'm) \quad (6)$$

feltéve, hogy $k \neq k'$. Az $a(kk')$ kétindexes szimbólum természetesen csak két egész számokból álló értékrendszerrel, k -től és k' -től függ. Csak a $k = k'$, $m = m'$, $n = n'$ eset van még hátra; most az

$$a(nm; nm) = a(nk; nk) + a(km; km)$$

összefüggést nyerjük. Eszerint írható:

$$a(nm; nm) = a(mm) - a(nn). \quad (7)$$

A (7) egyenlet kiegészíti a (6) egyenletet, megadva a $a(kk')$ definícióját a $k = k'$ esetre is. Az (5) egyenlet most így írható:

$$\begin{aligned} dx/dv(nm) &= \sum_{m' \neq m} a(nm; nm')x(nm') + \sum_{n' \neq n} a(nm; n'm)x(n'm) + a(nm; nm)x(nm) = \\ &= \sum_{m' \neq m} a(n'm)x(nm') - \sum_{n' \neq n} a(nn')x(n'm) + \{a(mm) - a(nn)\}x(nm) = \\ &= \sum_k \{x(nk)a(km) - a(nk)x(km)\}. \end{aligned}$$

Eszerint

$$dx/dv = xa - ax. \quad (8)$$

Így tehát az I. és II. törvényeket kielégítő legáltalánosabb operáció, melyet valamely kvantumváltozóra alkalmazhatunk, abban áll, hogy valamely más kvantumváltozóval képezett Heisenberg-szorzatainak különbségét vesszük. Könnyen belátható, hogy a differenciálások sorrendje általában nem cserélhető fel, azaz

$$\frac{d^2x}{du dv} \neq \frac{d^2x}{dv du}.$$

Példaképpen a kvantumdifferenciálásra vegyük azt az esetet, amikor a állandó, úgyhogy az $n = m$ esetet kivéve $a(nm) = 0$. Kapjuk:

$$dx/dv(nm) = x(nm)a(mm) - a(nn)x(nm).$$

Ha speciálisan $ia(mm) = \Omega(m)$, ahol $\Omega(m)$ az előzőekben bevezetett frekvenciaszint, kapjuk:

$$dx/dv(nm) = i\omega(nm)x(nm),$$

s az általunk bevezetett, v szerint végzett differenciálásból közönséges differenciálás lesz a t idő szerint.

4. A kvantumfeltételek

Most megvizsgáljuk, minek felel meg az $(xy - yx)$ kifejezés a klasszikus elméletben. Ebből a célból feltesszük, hogy $x(n, n - \alpha)$ az n -ek függvényeként lassan változik; az n -ek legyenek nagy számok, az α -k pedig kicsinyek, úgyhogy írhatjuk:

$$x(n, n - \alpha) = x_{\alpha\alpha},$$

ahol $\alpha_r = n_r h$ vagy $(n_r + \alpha_r)h$ (ez a két eset gyakorlatilag ekvivalens). Ekkor kapjuk:

$$\begin{aligned} & x(n, n - \alpha)y(n - \alpha, n - \alpha - \beta) - y(n, n - \beta)x(n - \beta, n - \alpha - \beta) = \\ & = \{x(n, n - \alpha) - x(n - \beta, n - \beta - \alpha)\}y(n - \alpha, n - \alpha - \beta) - \\ & - \{y(n, n - \beta) - y(n - \alpha, n - \alpha - \beta)\}x(n - \beta, n - \alpha - \beta) = \\ & = h \sum_r \left\{ \beta_r \frac{\partial x_{\alpha\alpha}}{\partial \alpha_r} y_{\beta\beta} - \alpha_r \frac{\partial y_{\beta\beta}}{\partial \alpha_r} x_{\alpha\alpha} \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Fennáll

$$2\pi i \beta_r y_\beta \exp i(\beta\omega)t = \frac{\partial}{\partial w_r} \{y_\beta \exp i(\beta\omega)t\},$$

ahol a w_r -ek a szögváltozók: $w_r = \omega_r t / 2\pi$. Ennélfogva az $(xy - yx)$ különbség (nm) komponense a klasszikus elméletben az

$$\begin{aligned} & \frac{ih}{2\pi} \sum_{\alpha+\beta=n-m} \sum_r \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha_r} \{x_\alpha \exp i(\alpha\omega)t\} \frac{\partial}{\partial w_r} \{y_\beta \exp i(\beta\omega)t\} - \right. \\ & \left. - \frac{\partial}{\partial \alpha_r} \{y_\beta \exp i(\beta\omega)t\} \frac{\partial}{\partial w_r} \{x_\alpha \exp i(\alpha\omega)t\} \right\} \end{aligned}$$

kifejezésnek felel meg; magának $(xy - yx)$ -nek

$$-\frac{ih}{2\pi} \sum_r \left\{ \frac{\partial x}{\partial \alpha_r} \frac{\partial y}{\partial w_r} - \frac{\partial y}{\partial \alpha_r} \frac{\partial x}{\partial w_r} \right\}$$

a megfelelője. Ha a α_r -eket egyenlőknek választjuk a J_r hatásváltozókkal, ez az

$$[x, y] = \sum_r \left\{ \frac{\partial x}{\partial w_r} \frac{\partial y}{\partial J_r} - \frac{\partial y}{\partial w_r} \frac{\partial x}{\partial J_r} \right\} = \sum_r \left\{ \frac{\partial x}{\partial q_r} \frac{\partial y}{\partial p_r} - \frac{\partial y}{\partial q_r} \frac{\partial x}{\partial p_r} \right\}$$

Poisson-féle (vagy Jacobi-féle) zárójeles kifejezés $ih/2\pi$ -szeresével lesz egyenlő (a p -k és a q -k a rendszer kanonikus változóinak tetszőleges sorozatát képezik).

Az elemi Poisson-féle zárójeles kifejezések értékei a p - k és q - k különböző kombinációi esetére:

$$\left. \begin{aligned} [q_r, q_s] &= 0, & [p_r, p_s] &= 0, \\ [q_r, p_s] &= \delta_{rs} = 0, & (r \neq s) \\ &= 1, & (r = s). \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Az általános zárójeles kifejezések eleget tesznek az I, II törvényeknek, melyek most így írhatók

$$[x, z] + [y, z] = [x + y, z], \quad \text{IA}$$

$$[xy, z] = [x, z]y + x[y, z]. \quad \text{IIA}$$

Ha x és y adottak mint a p_r -ek és q_r -ek algebrai függvényei, úgy az $[x, y]$ zárójeles kifejezés IA, IIA, valamint $[x, y] = -[y, x]$ segítségével előállítható a $[q_r, q_s]$, $[p_r, p_s]$ és $[q_r, p_s]$ Poisson-zárójelek kifejezésekként, s így kiszámítható, anélkül, hogy a szorzás kommutatív törvényét felhasználnánk (kivéve annyiban, amennyiben azt implicate fel kell használni IIA bizonyításához). Az $[x, y]$ zárójeles kifejezésnek tehát a kvantumelméletben is van jelentése, ha x és y kvantumváltozók, amennyiben elfogadjuk, hogy az elemi zárójeles kifejezéseket továbbra is (10) adja meg.

Azt az alapvető feltevést tesszük, hogy két kvantummennyiség Heisenberg-szorzatának különbsége egyenlő azok Poisson-féle zárójeles kifejezésének $ih/2\pi$ -szeresével. Képlettel kifejezve:

$$xy - yx = ih/2\pi [x, y]. \quad (11)$$

Láttuk, hogy ez a klasszikus elmélet határesetében azzal ekvivalens, hogy a megoldásokat jellemző tetszőleges x_r mennyiségeket a J_r -ekkel választjuk egyenlőkké. Ésszerűnek látszik, hogy (11)-et válasszuk általános kvantumfeltételnek.

Nem nyilvánvaló, vajon a (11) egyenlet szolgáltatja összes információ nem rejt-e magában ellentmondást. Minthogy a (11) egyenlet két oldalán szereplő mennyiségek ugyanazoknak az I és II vagy IA és IIA törvényeknek tesznek eleget, (11) csak akkor szolgáltat független feltételeket, ha x -nek és y -nak p -ket és q -kat választunk:

$$\left. \begin{aligned} q_r q_s - q_s q_r &= 0 \\ p_r p_s - p_s p_r &= 0 \\ q_r p_s - p_s q_r &= \delta_{rs} ih/2\pi \end{aligned} \right\}. \quad (12)$$

Ha az egyetlen okunk arra, hogy úgy véljük, a (12) egyenletek egymással és a mozgásegyenletekkel összeférnek, az volna, hogy tudjuk róluk, a $h \rightarrow 0$ határesetben összeférnek, nem állnánk nagyon szilárd talajon. Hiszen megtörténhetnék, hogy levezethető belőlük az ellentmondást tartalmazó $h=0$ eredmény, mely a $h \rightarrow 0$ határesetben nem tartalmaz ellentmondást. Ennél sokkal erősebb bizonytságot nyújt az a tény, hogy a klasszikus operációk ugyanazon törvényeknek engedelmeskednek, mint a kvantumoperációk, így ha a kvantumoperációkat alkalmazva valamely ellentmondás nyerhető, ugyanolyan módon alkalmazva a klasszikus operációkat, ugyancsak ellentmondást kell nyernünk. Ha a klasszikus operációk valamely sorozata a $0=0$ egyenlőségre vezet, a kvantumoperációk megfelelő sorozatának ugyancsak a $0=0$ egyenlőségre kell vezetnie, nem pedig $h=0$ -ra, minthogy nincs rá mód,

hogy kvantumváltozókkal elvégzett kvantumoperációk segítségével el nem tűnő mennyiséget nyerjünk, ha a megfelelő klasszikus változókkal elvégzett megfelelő klasszikus operációk eltűnő mennyiséget adnak. A fent említett lehetőség, hogy kvantumoperációk segítségével a $\hbar=0$ ellentmondást származtassuk le, eszerint nem áll fenn. *A korrespondencia a kvantumelmélet és a klasszikus elmélet között nem annyira a $\hbar \rightarrow 0$ határesetben adódó egyezésben rejlik, hanem inkább abban a tényben, hogy a két elmélet matematikai operációira sok esetben azonos törvények érvényesek.*

Egy szabadsági fokú rendszer esetében, ha felhasználjuk a $p = m\dot{q}$ képletet, az egyetlen kvantumfeltétel

$$2\pi m(\dot{q}\dot{q} - q\ddot{q}) = i\hbar.$$

A bal oldal konstans részét $i\hbar$ -val egyenlővé téve kapjuk:

$$4\pi m \sum_k q(nk)q(kn)\omega(kn) = \hbar.$$

Ez ekvivalens Heisenberg kvantumfeltételével [2]. A bal oldal többi komponensét zérussal egyenlővé téve további összefüggéseket nyerünk, melyek Heisenberg elméletéből nem adódtak ki.

A (12) kvantumfeltételek sok esetben átsegítenek a nehézségeken, melyek a mozgásegyenletekben szorzatokban fellépő mennyiségek sorrendjét illetik. A sorrend lényegtelen, kivéve ha p_r és q_r vannak összeszorozva és ez sohasem fordul elő olyan rendszer esetében, amely leírható egy csak a q -któl függő potenciális energia és egy csak a p -któl függő kinetikus energia segítségével.

Megjegyezzük, hogy az atomok okozta szórás Kramers—Heisenberg-féle elméletében [3] fellépő klasszikus mechanikai mennyiség a (8) alakú komponensekkel rendelkezik (s benne $\kappa_r = J_r$), és értelmezése a kvantumelméletben a jelen elmélettel egybehangzóan történik. Differenciálhányadosokat tartalmazó klasszikus kifejezés értelmezése csak akkor lehetséges a kvantumelméletben, ha az ilyen alakra hozható.

5. A kvantumelméleti Poisson-féle zárójeles kifejezések tulajdonságai

Ebben a szakaszban leszámaztatunk néhány eredményt, melyek függetlenek a (11) vagy (12) kvantumfeltételek feltételezésétől.

A Poisson-féle zárójeles kifejezések a klasszikus elméletben eleget tesznek az

$$[x, y, z] \equiv [[x, y], z] + [[y, z], x] + [[z, x], y] = 0 \quad (13)$$

azonosságnak. A kvantumelméletben ez az eredmény nyilvánvalóan igaz, ha x, y és z helyére p -ket és q -kat helyettesítünk. Ezenkívül IA-ból és IIA-ból következik:

$$[x_1 + x_2, y, z] = [x_1, y, z] + [x_2, y, z]$$

és

$$[x_1 x_2, y, z] = x_1 [x_2, y, z] + [x_1, y, z] x_2.$$

Az eredménynek eszerint ugyancsak igaznak kell lennie a kvantumelméletben, ha x, y és z felépíthetők p -kből és q -kből összeadás és szorzás segítségével; így tehát általános érvényűnek kell lennie. Megjegyezzük, hogy a (13)-nak megfelelő azonosság, ha a Poisson-féle zárójeles kifejezéseket a Heisenberg-szorzatok $xy - yx$ különb-

ségével helyettesítjük, nyilvánvalóan teljesül, így tehát nem adódik ellentmondás a (11) egyenlettel.

Ha H a rendszer Hamilton-függvénye, a mozgásegyenletek klasszikusan így írhatók:

$$\dot{p}_r = [p_r, H], \quad \dot{q}_r = [q_r, H].$$

Ezek az egyenletek a kvantumelméletben is érvényesek lesznek olyan rendszerekre, amelyek esetében a mozgásegyenletekben előforduló szorzatok tényezőinek sorrendje lényegtelen. Érvényesnek fogadhatók el olyan rendszerekre is, amelyek esetében ez a sorrend lényeges, ha el tudjuk dönteni, hogy milyen legyen H tényezőinek sorrendje. Az IA, IIA törvényekből következik, hogy

$$\dot{x} = [x, H] \quad (14)$$

a kvantumelméletben bármely x -re fennáll.

Ha A a mozgásegyenletek valamely integrálja a kvantumelméletben, úgy

$$[A, H] = 0.$$

A J_r hatásváltozóknak természetesen teljesíteniök kell ezt a feltételt. Ha A_1 és A_2 két ilyen integrál, úgy (13) egyszerű alkalmazásával következik, hogy

$$[A_1, A_2] = \text{const.},$$

éppúgy, mint a klasszikus elméletben.

A klasszikus elméletben annak feltétele, hogy a változók valamely P_r, Q_r sorozata kanonikus legyen:

$$[Q_r, Q_s] = 0, \quad [P_r, P_s] = 0,$$

$$[Q_r, P_s] = \delta_{rs}.$$

Ezek az egyenletek átvehetők a kvantumelméletbe annak feltételeként, hogy a P_r, Q_r kvantumváltozók kanonikusak legyenek.

A klasszikus elméletben bevezethetjük a kanonikus változók ξ_r, η_r sorozatát, mely a J_r hatás- és a w_r szögváltozókkal a

$$\xi_r = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} J_r^{\frac{1}{2}} \exp 2\pi i w_r, \quad \eta_r = -i(2\pi)^{-\frac{1}{2}} J_r^{\frac{1}{2}} \exp (-2\pi i w_r)$$

kapcsolatban áll. Feltehetően a kvantumelméletben is létezik a kanonikus változók ennek megfelelő szorzata; azt várjuk, hogy e változók komponenseire fennáll: $\xi_r(mn) = 0$, kivéve, ha $m_r = n_r - 1$ és $m_s = n_s$ ($s \neq r$) és $\eta_r(mn) = 0$, kivéve ha $m_r = n_r + 1$ és $m_s = n_s$ ($s \neq r$). Az ilyen változók létezése felfogható, mint annak feltétele a kvantumelméletben, hogy a rendszer többszörösen periodikus legyen. A ξ_r, η_r változók Heisenberg-szorzatainak komponensei eleget tesznek a

$$\xi_r \eta_r(nm) = \xi_r(nm) \eta_r(mn) = \eta_r(mn) \xi_r(nm) = \eta_r \xi_r(mm) \quad (15)$$

összefüggésnek, ahol az m -ek és n -ek kapcsolatát az $m_r = n_r - 1, m_s = n_s$ ($s \neq r$) képletek fejezik ki.

A klasszikus ξ -k és η -k eleget tesznek a $\xi_r \eta_r = -i/2\pi \cdot J_r$ összefüggésnek. A kvantumelméletben az összefüggés lehet pl. $\eta_r \xi_r = -i/2\pi \cdot J_r$ vagy $\frac{1}{2}(\xi_r \eta_r + \eta_r \xi_r) = -i/2\pi \cdot J_r$. Annak eldöntésére, hogy milyen ezen összefüggés pontos alakja,

szükséges lehet az adott speciális dinamikai rendszer részletes vizsgálata. Ha az utóbbi összefüggés áll fenn, bevezethetjük a

$$\xi'_r = (\xi_r + i\eta_r)/\sqrt{2}, \quad \eta'_r = (i\xi_r + \eta_r)/\sqrt{2}$$

összefüggésekkel definiált ξ'_r, η'_r kanonikus változókat; ily módon kapjuk:

$$J_r = \pi(\xi_r'^2 + \eta_r'^2).$$

A harmonikus oszcillátor esetében ténylegesen ez a helyzet. Általában J_r még csak nem is szükségképpen racionális függvénye a ξ_r -eknek és η_r -eknek. Erre példa a merev rotátor, melyet *Heisenberg* vizsgált.

6. A stacionárius állapotok

Valamely C mennyiségnek, mely nem változik az időben, valamennyi (nm) komponense zérus, kivéve azokat, amelyekre $n=m$. Célszerűnek bizonyul tehát feltenni, hogy az n -ek minden egyes sorozata az atom egy-egy állapotához tartozik mint Bohr elméletében, úgyhogy minden egyes $C(nm)$ ugyanúgy hozzátartozik valamely állapothoz, amiképpen a klasszikus elméletben előforduló *minden* mennyiség valamely meghatározott konfigurációhoz tartozik. Az időben változó kvantummennyiségek komponensei olyannyira egymáshoz kapcsolódnak, hogy lehetetlen közülük néhánynak összegét valamely adott állapothoz hozzárendelni.

Valamely kvantummennyiségek között fennálló összefüggés, ha a benne szereplő mennyiségek valamennyien állandók, egy-egy meghatározott állapothoz tartozó $C(nm)$ -ekre érvényes összefüggéssé egyszerűsödik. Feltevésünk értelmében, mely szerint a stacionárius állapotok leírására a klasszikus törvények érvényesek, ez az összefüggés ugyanolyan alakú lesz, mint a klasszikus elméletben volt; speciálisan az energia mint a J -k függvénye a klasszikus elméletben megismert alakú lesz. Megkaptuk tehát a stacionárius állapotok mechanikai természetére vonatkozó Bohr-féle feltevés igazolását. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy a Bohr-elméletben a stacionárius állapotoknak megfelelően változó mennyiségek, a pályamenti mozgás amplitúdói és frekvenciái fizikai jelentéssel nem rendelkeznek és matematikai szempontból lényegtelenek.

Ha az alapvető (11) összefüggést az x és H mennyiségekre alkalmazzuk, (14) segítségével kapjuk:

$$x(nm)H(mm) - H(nn)x(nm) = i\hbar/2\pi \cdot \dot{x}(nm) = -\hbar/2\pi \cdot \omega(nm)x(nm)$$

vagy

$$H(nn) - H(mm) = \hbar/2\pi \cdot \omega(nm).$$

Ez éppen a rezgésszámok és az energiakülönbségek kapcsolatát megadó Bohr-féle összefüggés.

A (11) kvantumfeltételt a korábban bevezetett ξ_r, η_r kanonikus változókra alkalmazva kapjuk:

$$\xi_r\eta_r(nm) - \eta_r\xi_r(nn) = i\hbar/2\pi \cdot [\xi_r, \eta_r] = i\hbar/2\pi.$$

Ezt az egyenletet (15)-tel kombinálva a

$$\xi_r\eta_r(nm) = -n_r i\hbar/2\pi + \text{const.}$$

eredményre jutunk.

Fizikailag ismert, hogy az atomnak van egy normálállapota, melyben nem sugároz. Heisenberg ezt elméletében azon feltevés segítségével veszi tekintetbe, hogy a negatív n_r -hez vagy m_r -hez tartozó valamennyi $C(nm)$ amplitúdó eltűnik, vagy inkább nem létezik, feltéve, hogy a normálállapothoz az n_r -ek mindegyikének zérus értékét rendeljük. Ekkor (15) folyományaképpen $n_r=0$ mellett $\xi_r \eta_r(nm)=0$. Eszerint általában

$$\xi_r \eta_r(nm) = -n_r i \hbar / 2\pi.$$

Ha $\xi_r \eta_r = -i/2\pi \cdot J_r$, úgy $J_r = n_r \hbar$. Ez éppen a stacionárius állapotok kvantálására szolgáló közös szabály, úgyhogy ebben az esetben a rendszer frekvenciái megegyeznek a Bohr-elmélet szolgáltatta frekvenciákkal. Ha $\frac{1}{2}(\xi_r \eta_r + \eta_r \xi_r) = -i/2\pi \cdot J_r$, úgy $J_r = (n_r + \frac{1}{2})\hbar$. Ennélfogva ebben az esetben általában feles kvantumszámokat kellene használnunk ahhoz, hogy Bohr elmélete a helyes frekvenciákat adja [4].

Mindeddig csak többszörösen periodikus rendszereket vizsgáltunk. Nem látunk azonban semmiféle okot, mely az ellen szólna, hogy a (11) és (12) alapegyenletek olyan nem-periodikus rendszerekre is érvényesek legyenek, amelyeknek alkotóelemei nem távoznak a végtelenbe; ilyen pl. egy tetszőleges atom. Nem várható, hogy az ilyen rendszerek stacionárius állapotai klasszifikálhatók legyenek, kivéve talán azt az esetet, ha léteznek bizonyos kitüntetett periodikus mozgások; ilyenkor önkényes elgondolás szerint kell az egyes stacionárius állapotokhoz egy-egy n számot rendelnünk. Kvantumváltozóink ilyen esetben is harmonikus komponensekkel rendelkeznének, melyek mindegyike két n értéknek felelne meg, és a Heisenberg-szorítás ugyanúgy lenne elvégezhető, mint az előbbi esetekben. A (12) egyenletek vagy a mozgásegyenletek egyértelmű értelmezését illetően így tehát semmiféle kétség nem merülhet fel.

Szeretném köszönetemet nyilvánítani R. H. Fowler úrnak, a Királyi Társaság tagjának e dolgozat írása folyamán tett számos értékes megjegyzéséért.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

- [1] Heisenberg, Zeits. f. Phys., 33, 879 1925.
- [2] Heisenberg, loc. cit. (16) egyenlet.
- [3] Kramers, Heisenberg, Zeits. f. Phys., 31, 681. old. (18) egyenlet, 1925.
- [4] A Planck-féle oszcillátor speciális esetében, minthogy itt az energia J -nek lineáris függvénye, a frekvencia mindenképpen helyesen adódnék ki.

Előzetes jelentés az 1967-ben IUPAP (International Union of Pure Applied Physics) támogatásával rendezendő konferenciákról:

1. MÁGNESSÉG ÉS MÁGNESES ANYAGOK. CAMBRIDGE, USA
2. MAGSTRUKTÚRA. TOKIÓ.
3. KOZMIKUS SUGÁRZÁS. KANADA.

Előzetes jelentés tervezett nemzetközi konferenciákról:

1967.

ELEKTRONOK ÉS ATOMOK ÜTKÖZÉSE. LENINGRÁD.

1968.

GRAVITÁCIÓ ÉS AZ ÁLTALÁNOS RELATIVITÁSELMÉLET. TBILISZI.
FÉLVEZETŐ KONFERENCIA. SZOVJETUNIÓ.

OPTIKAI PUMPÁK ÉS A SZÍNKÉPVONALAK ALAKJAI. VARSÓ.

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1965. XII. 13. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 8,4 (A/5) iv

66-5888 — Szegedi Nyomda

M. Zemplén Jolán

**A MAGYARORSZÁGI FIZIKA TÖRTÉNETE
1711-IG**

317 oldal — 46 részben fakszimile ábra — 17×24 cm

Kötve 80,— Ft

A szerző hatalmas forrásanyagon nyugvó munkája első ízben ad teljes képet a magyarországi fizika korai történetéről. Fejtegetései nyomán kitűnik, miként jutott a fizika tudománya egy-egy gondolattal előbbre, hogyan tértek át az arisztoteleszi és egyházi dogmákról lassan a kísérleteken alapuló mai fizikára.

*

M. Zemplén Jolán

**A MAGYARORSZÁGI FIZIKA TÖRTÉNETE
A XVIII. SZÁZADBAN**

495 oldal — 124 nagyrészt fakszimile ábra — 17×24 cm

Kötve 100,— Ft

M. Zemplén Jolán ebben a könyvében a fizika történetének azt a korszakát tárgyalja, amelyben az ún. klasszikus fizika elterjed és megszilárdul, s a fizika a természettudomány többi ágával együtt önálló, a filozófiától független szaktudománnyá válik.



**AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST**

Fenyves Ervin—Haimann Ottó

DIE PHYSIKALISCHEN GRUNDLAGEN DER KORNSTRAHLUNGSMESSUNGEN

(Magsugárásmérések fizikai alapjai)

*Német nyelven — 727 oldal — 370 ábra — 29 táblázat
17×24 cm — Kötte 340,— Ft*

A kötet bevezetőben a magsugárásmérések történetét tárgyalja, majd rátér a magsugárzások és az anyag kölcsönhatásának elemzésére, ismerteti a részecskeszámlálók működésének fizikai alapelveit és a részecskeszámlálókkal végezhető fontosabb mérési módszereket.

*

ABSORPTION SPECTRA IN THE ULTRAVIOLET AND VISIBLE REGION

(Ultraibolya abszorpciók színekgyűjtemény)

I—VI kötet (VII. kötet előkészületben)

Gyűrűs dossziében — Angol nyelven — Kötetenkint kötve 350,— Ft

A nemzetközi viszonylatban is nagy érdeklődést keltett sorozat az abszorpciók spektroszkópiai kutatások legújabb adatait tartalmazza, különös tekintettel a hazai kutatások eredményeire. Elsősorban olyan színekpeket hoz nyilvánosságra, amelyek hasonló munkákban eddig még nem láttak napvilágot.



**AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST**

MAJTH
INDOMANTUS INDEMLA
KONTIARA

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Solt György</i> : Kristályok dinamikájának vizsgálata lassú neutronok szórásával	89
<i>Veres Árpád</i> : A ^{60}Co γ -sugaraival előállított magizomér hatáskeresztmetszetek kísérleti körülményektől való függésének vizsgálata	143
<i>Zámori Zoltán</i> : Gyors koincidenciakör és időfelbontás	161

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>P. A. M. Dirac</i> : A kvantummechanika alapegyenletei	171
-----------------------------------------------------------------	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIV. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KISÜLÉSEK SZONDAMÉRÉSEI I.

EGYENÁRAMÚ SZONDAMÉRÉSEK

BITÓ JÁNOS

Híradástechnikai Ipari Kutató Intézet, Budapest

A szondamérési módszer történeti kialakulásának ismertetése után a szerző részletesen tárgyalja a Langmuir által felfedezett szondamérési elvet. Az ideális Langmuir-féle szondakarakterisztika egyes jellemző szakaszainak értelmezésével együtt bemutatásra kerülnek a különböző kisülési jellemzők meghatározási lehetőségei a karakterisztika egyes szakaszainak ismeretében. Sor kerül a töltéshordozók Maxwell—Boltzmann- és Druyvesteyn-féle eloszlásának a szondakarakteristikából való meghatározására. A szerző bemutatja az egyes szondaállapotok jellemző összefüggéseit a gázkinetikai alapegyenletekből és a Poisson-egyenletből kiindulva. Foglalkozik a két- és többszondás mérési módszerrel, bemutat további egyszondás mérési eljárásokat, megadja a szondamérések kísérleti jellemzését és végül ismerteti a mérések főbb hibaforrásait, utal az eredmények várható pontosságára.

I. Bevezetés

A kisülési paraméterek egy része direkt módon kísérleti úton meghatározható. Ezek mellett azonban az egyes kisülési típusoknál lejátszódó folyamatok elemzéséhez feltétlenül szükséges olyan további jellemzők megadása is, mint pl. a töltéshordozók energiája, koncentrációja, azok átlagos energiájának függése az elektromos térerősség és gáznyomás hányadosától, sebességeloszlásuk stb. Alapvetően fontos megadni, hogy a töltéshordozók energiája, pl. a Maxwell—Boltzmann eloszlási függvénynel, vagy a komplikáltabb Druyvesteyn-eloszlással jellemezhető. Ionizált gázok, plazmák esetén az eloszlási függvények számítás útján való meghatározása igen körülményes és számos nehézségbe ütközik. Szerencsére elég nagy elektronkoncentrációk mellett (10^8 — 10^{10} elektron/cm³) lehetőség nyílik az energiaeloszlás kísérleti meghatározására és az átlagos energiafüggvény megadására, az elektromos segéd-elektrodák — a szondák — alkalmazása révén.

Már az 1890-es években Crookes alkalmazott szondákat gázkisülések vizsgálatánál [1]. Eredményeit 1906-ban J. S. Townsend diszkutálta [1], s azokból következtetéseket vont le, azonban e módszer lehetőségeit még akkor nem ismerték fel. A kisülésbe helyezett vezető darab sztatikus feltöltődése révén nyert eredmények nem adtak elegendő és kielégítő pontosságú információt a kisülés alapvető jellemzőiről. Mindemellett alkalmazhatósági körük is igen korlátozott volt.

E kérdés 1923-ban nyert teljes tisztázást, amikor is I. Langmuir és H. M. Mott-Smith kidolgozták az azóta már klasszikussá vált szondamérési módszert [2], amely jelenleg is az egyik legalkalmasabb mód az egyes fontosabb kisülési mikroparaméterek és eloszlások egyenáramú kisüléseknél történő megadására.

Langmuir szondamérésekkel kapcsolatos eredményei gyorsan elterjedtek a világban, ezt követően széles körben kezdték alkalmazni e vizsgálati módszert, azon különböző finomításokat végezve [1, 3]. Mindenesetre meg kell jegyezni, hogy a

* Érkezett 1964 júliusában.

módszer mai formájában sem alkalmazható minden körülmények között, annak kiterjesztését korlátozza többek között a kisülés esetenként fellépő jelentős saját-mágnestere és a külső mágnes tér jelenléte, valamint a nagy ionizációs fokú „forró plazmák” koncentráció-viszonyai, stb.

Jelenlegi formájában a szondamérés egyenáramú kisülések esetén lehetőséget nyújt a töltéshordozók energiájának, koncentrációjának, a fali potenciálnak, plazmapotenciálnak, az eloszlási függvénynek, s amennyiben ez Maxwell—Boltzmann eloszlás, úgy az átlagos energiának a meghatározására. Ez igen számottevő információs anyag, ugyanis ezen adatok birtokában számos más kisülési jellemző adható meg, mondhatni közel teljes anyag a kisülési, vagy plazmadiagnózis elkészítéséhez.

A kisüléseknél alkalmazott szondamérési eljárás sokban rokon az elektrolitek esetében alkalmazott nagyellenállású szondázással, amely ott főleg az ekvipotenciális felületek kimérését teszi lehetővé, nem okozva számottevő zavart magában a vizsgálandó elektrolitban.

Kisüléseknél a kisülésbe nyúló vezetőanyagú szondát pozitív tértöltés veszi körül, s ezzel mintegy leárnyékolódik a szonda. Hatása csak a tértöltési réteg határáig érződik, ezen túl úgy vehető, hogy az eredeti kisülési viszonyok változatlanul maradnak. E polarizációs jellegű folyamat magyarázata [2] az elektronok fali diffúziós áramlásának figyelembevételével adható meg. A tapasztalat szerint [2] minden, kisülésbe, vagy plazmába nyúló vezető, vagy szigetelt test a kisülési térhez képest (plazmához képest) negatív potenciálra töltődik fel, amit fali potenciálnak [2] szokás nevezni. Értéke meghatározható többek között az itt ismertetésre kerülő szondamérési módszerek segítségével is.

A jelen dolgozat keretében röviden sor kerül az egyenáramú kisülések esetében általában alkalmazható, ún. Langmuir-féle szondamérés elvi alapjainak és kísérleti technikájának ismertetésére, majd annak az eloszlási függvények meghatározásánál és számolásánál való alkalmazására. A módszer értékelése és kritikája, alkalmazhatósági kritériumai után bemutatásra kerülnek a fontosabb kétszondás mérési módszerek, majd pedig a kisülési jellemzők speciális körülmények közötti meghatározására szolgáló szondamérési eljárások, így a nem-stacioner kisülések szondamérései, a mágneses térben végzett elektromos és mágneses természetű szondamérések.

Meg kell jegyezni, hogy az előzőekben említett néhány kisülési és plazmajellemzők meghatározására nem egyedül csak a szondamérés ad lehetőséget. Így pl. a Townsend-féle diffúziós módszerrel [4] is megadható nem-stacioner áramlások esetén az elektronok sebességeloszlási függvénye a laterális diffúzió és a térirányban való mozgás összevetése révén, bizonyos E/p értékek esetében (E = potenciálgradiens, p = gáznyomás). Egyes esetekben viszonylag könnyen, számítással is meghatározható az eloszlási függvény a Ramsauer-féle szabad úthosszak és a gerjesztési függvények, valamint néhány további kisülési paraméter ismeretében.

Az elektronhőmérsékletek is megadhatók más úton, többek között zajmérések révén is [5]. Ez esetben nagyfrekvenciás kört iktatnak be a kisülés egy szakaszánál, s a mért zajhőmérséklet jó közelítéssel megegyezik az elektronhőmérséklettel.

Olyan optikai módszerek [6] is ismeretesek, amelyek lehetővé teszik az eloszlási függvény megadását egy adott vonalsorozat relatív intenzitásának meghatározása révén. Ezen optikai módszerek azonban csak nagynyomású kisülések esetében adnak kielégítő pontosságú eredményeket.

Az itt ismertetett néhány módszer segítségével többé-kevésbé ugyanazon kisülési és plazmajellemzők határozhatók meg, mint a szondamérésekkel. Annak az oka,

hogy a szondamérések mégis sokkal kiterjedtebben kerülnek alkalmazásra, abban van, hogy viszonylag gyorsan, elég nagyszámú paraméter egyszerű módszerrel való meghatározását biztosítják. Nem igényelnek nagy apparatív felkészültséget, s esetenkénti alkalmazhatóságukról igen könnyen meg lehet bizonyosodni, az alapvető, könnyen ellenőrizhető alkalmazhatósági kritériumok figyelembevételével.

II. 1. Az egyenáramú kisüléseknél alkalmazható egy- és kétszondás szondamérések

a) Kiindulási feltételek, alapegyenletek

Az itt használandó terminológia értelmében a „szonda” megjelölés olyan elrendezést — általában segédelektrodát — jelent, amely segítségével a vizsgálandó kisülés, vagy plazma valamely helyi fizikai paramétere megadható. E segédelektrodák méreteit, a kisülés egyes mikrofizikai paramétereireihez képest, pl. az elektronok közepes szabad úthosszához képest lehetőség szerint kicsire célszerű megválasztani, hogy ezáltal minél kevésbé zavarja a vizsgált tér folyamatait. A szonda, alakját tekintve lehet sík, gömb, hengeres, szegletes és védőgyűrűs kivitelű sík áramfelvívó felületű segédelektroda.

A kisülési térbe helyezett szonda — mint az előzőekben már ez említésre került — a kisülési térhez képest negatív potenciálra töltődik fel [2], ami megfelel az ún. fali-potenciálnak. Hengerszimmetrikus kisülési viszonyok között a pozitív ionok radiális mozgása esetén adódó sebességeloszlás a kísérletek szerint nem felel meg a Maxwell—Boltzmann eloszlásnak [2]. Az ionok radiális irányú sebessége az elektronok és azok mikroterei révén leadott energiából ered. Ennek következtében az ionok radiális sebessége számottevően kisebb, mint az elektronoké.

A kísérletek eredményei azt mutatják [2], hogy a falra érkező ionok radiális sebesség-komponense közelítőleg olyan ionhőmérsékletnek felel meg, amely az elektronok plazma szélén (fali határréteg mentén) mért hőmérsékletének mintegy a fele. Kiindulva az alapvető gázkinetikai egyenletekből, a radiális elektronáram-sűrűség és a radiális ionáram-sűrűség hányadosára adódik

$$\frac{j_e}{j_i} = \frac{1}{2} \left[\frac{T_e \cdot m_i}{T_i \cdot m_e} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

ahol j_e az elektronáram-sűrűség radiális komponense

j_i az ionáram-sűrűség radiális komponense

T_e az elektronhőmérséklet

T_i az ionhőmérséklet

m_e az elektronok tömege

m_i az ionok tömege.

Higanygőzkisülés esetén az előzőek figyelembevételével a fenti hányados értéke:

$$\frac{j_e}{j_i} = 429. \quad (2)$$

Kísérletileg is megtörtént a radiális áramsűrűség-komponensek hányadosának meghatározása. E hányados átlagértékére 411 ± 17 adódott [2].

Ez azt jelenti, hogy a kisülési cső fala a [2] összefüggés értelmében a körülötte levő gáztér potenciáljához képest negatívabbra töltődik fel. Ennek megfelelően

negatívabbra töltődik fel a fallal megegyező potenciállal bíró szonda is. A plazma és a fal között egy kettős réteg alakul ki, amellyel a plazma biztosítani igyekszik kvázineutralitását és eredeti állapotát.

Kiindulva az elektronkoncentrációra feltételezett Maxwell—Boltzmann eloszlásból, hasonló eloszlás adható meg az elektronáram-sűrűségekre is, mivel az elektronkoncentráció arányos az elektronáram sűrűségével:

$$j = j_0 \cdot e^{-\frac{eV_f}{kT_e}}, \quad (3)$$

ahol

- j a retardáló térben fal felé mozgó elektronok áramsűrűsége
- j_0 az elektronáram-sűrűség a fali határfelületek közelében levő perturbátatlan plazmában
- V_f a fal és a plazma közötti potenciálkülönbség
- e az elektronok töltése
- k a Boltzmann-állandó
- T_e az elektronok hőmérséklete.
- A (2) összefüggés alapján

$$V_f = -6,06 \frac{T_e}{11600}. \quad (4)$$

Ennek megfelelően a fenti közelítés esetén ha az elektronok hőmérséklete pl. $T_e = 25\,000\text{ °K}$, úgy a fal potenciálja 13 V-al lesz alacsonyabb, mint a mellette elhelyezkedő plazmáé. Ez esetben az ittlevő szonda is ezt a potenciált veszi fel, s a szondát pedig a plazma felé pozitív tértöltés árnyékolja le [2]. Ilyen módon nem ad felvilágosítást a szonda potenciálja a kisülés szóban forgó helyén levő valódi potenciálról. Ha két vagy több szonda helyezkedik el a kisülés különböző pontján, úgy ezek más és más potenciálra töltődnek fel a kisülési tengely mentén elfoglalt helyük és a kisülésbe való benyúlási mélységük révén. Az itt ismertetett sztatikus jellegű feltöltődésük lehetőséget nyújt a közöttük fennálló feszültség-különbség sztatikus műszerrel való meghatározására. Jó közelítéssel e feszültség-különbség megfelel a kisülési tér vizsgált pontjai között fennálló feszültség-különbségnek. Ezen adat meghatározásán túlmenően más paramétert ilyen módon elvégzett szondás mérés útján nem lehet nyerni.

Ahhoz, hogy további kisülési paramétereket is meg lehessen határozni, *Langmuir* [2] egy külső elektromos kör révén változtatta a szonda valamelyik referencia elektródhoz képest vett potenciálját, s a szondán ez esetben lefolyó áramot a szondára jutó feszültség függvényében felvette és ábrázolta mint karakterisztikus görbét [2]. E szondakarakterisztika alakjából, jellemző pontjaiból, menetéből a *Langmuir*-féle módszerrel meghatározhatók a fontosabb plazmajellemzők.

A szonda körül végbemenő folyamatok vizsgálatához, s a módszer alkalmazásához az alábbi alapvető feltevéseket kell tenni:

1. A szondát körülvevő tértöltési rétegen kívül a térerősség értéke és a tértöltés koncentrációja kicsi, a szondától perturbátatlan.

2. A tértöltési réteg vastagsága az elektronok és az ionok közepes szabad úthosszához viszonyítva kicsi, azaz számottevő kölcsönhatási, szóródási jelenségek e tértöltési tartományban nem alakulnak ki.

3. Az ionok és elektronok árama egymástól független, azaz a szonda elektromos tere és a töltéshordozók energiája szabja csak meg a szondára jutó áramsűrűséget.

4. A szonda nem emittál töltéshordozókat, s ezzel nem módosítja a plazmából hozzájutó töltéshordozók áramát.

5. A tértöltési rétegben ionizáció, gerjesztés, metastabil atomok keletkezése, s egyéb energia — vagy töltéshordozó — veszteséggel, vagy töltéshordozó koncentráció változással járó kölcsönhatás nincs.

6. A pozitív töltéshordozók egyneműek, negatív töltéshordozóként csak az elektronok jönnek számításba; azaz a szóban forgó gáz vagy gőz nem elektronegatív, negatív ionok nem alakulnak ki.

7. A szonda környezetében levő tértöltési rétegen kívüli plazma kvázineutrális, valamint az elektronok energiaeloszlása megfelel a Maxwell—Boltzmann energiaeloszlásnak, vagy a kevésbé perturbált Druyvesteyn-féle energiaeloszlásnak.

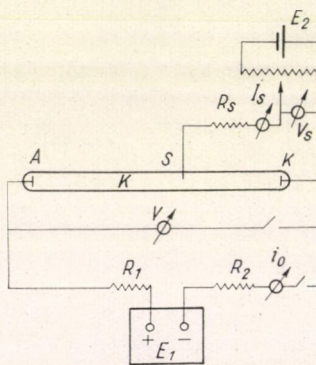
8. A szonda felületén kémiai reakciók nem játszódnak le, kontaktpotenciálja nem függ az időtől; fotoelektron-emissziót előidéző fényhatásnak a szonda felülete nincs kitéve.

9. A szonda geometriai méretei a töltéshordozók közepes szabad úthosszához képest kicsik, s emiatt a szonda a kisülés vizsgált területén nem kelt lényeges zavart az ott kialakult egyensúlyi állapotokban.

Az itt felsorolt feltevések közül néhány egymással szorosan összefügg, azok külön pontban való megemlítése fontosságuk hangsúlyozása érdekében történt. Ezen vizsgálati feltételek jórésze általában teljesül az alacsonynyomású gáz- vagy gőzkisülések esetében, s mint már az előzők során említésre került, e kezdeti feltételek könnyen ellenőrizhetők a mérések megkezdésekor.

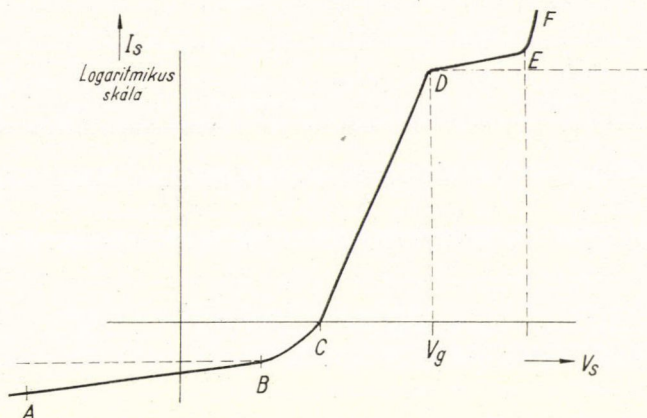
A vizsgálatnál, a szondára egy külső elektromos kör segítségével, pl. az 1. ábra szerinti kapcsolási elrendezésnek megfelelően, valamelyik kiválasztott elektródához képest különböző feszültség kerül. Az 1. ábrán bemutatott kapcsolási elrendezésben a K kisülési cső A anódja és K katódja között folyó i_0 kisülési áramot az R_1 , R_2 szimmetrikus elhelyezésű korlátozó ellenállás korlátozza, a kisülést az E_1 stabilizált egyenfeszültségű áramforrás tartja fenn. Az S szonda elektromos köre a K katódhoz képest van kialakítva, az S szonda és a K katód közötti egyenfeszültséget az E_2 stabilizált egyenfeszültségű áramforrás szolgáltatja.

A szondán lefolyó áramot az I_s műszer méri. Az R_s szondaköri ellenállás sarkairól levett feszültségkülönbség az oszcilloszkopikus ellenőrző vizsgálatoknál kerül felhasználásra, ahol az esetleges instabilitási és oszcillációs folyamatok ellenőrzése végbemehet. Amennyiben a szondakör a katódhoz képest épül ki, a mérések során a szondának — annak kisülésbeni helyétől függően — a katóddal megegyező és annál magasabb feszültséget kell biztosítani. A vizsgálat kísérleti részéről és a szükséges előzetes ellenőrző mérésekről ehelyen nem lesz szó, erre a továbbiakban kerül majd sor.



1. ábra. Az egyenáramú szondaméréseknél alkalmazott elektromos kapcsolási elrendezés blokkdiagramja

Ha a szondára a katódhoz képest különböző feszültség jut, úgy a szondán lefolyó szondaáram a szondafeszültség függvényében ábrázolva karakterisztikus görbét ad az ún. Langmuir-féle szondakarakterisztikát. A 2. ábrán az ideális szondakarakterisztika látható, tehát az abban az esetben felvett karakterisztikus görbe, amikor az itt



2. ábra. Az egyszondás mérések ideális szondakarakterisztikája
 \overline{AB} — az ionáram telítési szakasza; C — a falipotenciál, \overline{CD} — az elektronáram felfutási szakasza; D — a gáztér (plazma) potenciálja, \overline{DE} — az elektronáram telítési szakasza; \overline{EF} — a tértöltési rétegben meginduló ionizációk szakasza

ismertetett mérési feltételek maradéktalanul teljesülnek. Az Y tengelyre az I_s szondaáram logaritmus van felvéve, az X tengelyre pedig a V_s szondafeszültség. Mint látható, a karakterisztika több jól szétválasztható jellegzetes szakaszból tevődik össze. A különböző potenciállal bíró szonda és a plazma közötti potenciálesés minden esetben jó közelítésben a szondát körülvevő és az azt leárnyékoló tértöltési tartományban lép fel [2]. E tértöltési tartományban a Maxwell—Boltzmann eloszlás alapján (felhasználva az előzőekben megadott feltételezéseket) az elektron és ionkoncentrációkra írható [7]:

$$n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{eV}{kT_i}} \quad (5)$$

$$n_e = n_0 \cdot e^{\frac{eV}{kT_e}} \quad (6)$$

feltételezve, hogy

$$\frac{1}{k} eV \ll \max(T_i, T_e), \quad (7)$$

ahol

n_i az ionok koncentrációja a tértöltési tartományban

n_e az elektronok koncentrációja a tértöltési tartományban

n_0 a töltéshordozók egymással megegyező koncentrációja a perturbálatlan plazmában; a kvázineutralitás feltételezése mellett,

V a szonda környező kisülési térhez képest vett potenciálja.

A tértöltési rétegen túl, az annak környezetében levő plazma elektronkoncentrációját az ionkoncentrációval azonosnak lehet venni amennyiben a kvázineutralitás fennáll, mert mint a későbbiekben kiderül, a különböző potenciállal bíró szonda perturbáló tere a szondától megfelelő távolságban lecseng, a plazma egyensúlyi állapotát nem befolyásolja.

A V szondapotenciál (a környező kisülési tér potenciáljához viszonyított potenciál) és a tértöltések közötti összefüggés az előzőekben megadott (5), (6) egyenletek alkalmazásával a Poisson-egyenlet alapján:

$$\nabla^2 V = -4\pi \left(n_0 e^{-\frac{eV}{kT_i}} - n_0 e^{-\frac{eV}{kT_e}} \right), \quad (8)$$

ami a (7) feltétel alkalmazásával jó közelítésben megegyezik a

$$\nabla^2 V = 4\pi n_0 e^2 V \left[(T_i + T_e) \cdot \frac{1}{T_i \cdot T_e} \right] \quad (9)$$

alakú, egyszerűbben áttekinthető összefüggéssel. A potenciál értéke, s annak helyfüggése ezek alapján számolható. Pl. gömbszimmetrikus esetben a (9) egyenlet megoldásával a

$$V(r) = \frac{V_0}{r} \cdot e^{-\frac{r}{h}} \quad (10)$$

potenciálalak adódik, amely az ismert Debye—Hückel potenciálnak felel meg, ahol

$$h = \sqrt{\frac{T_e \cdot T_i}{4\pi n_0 e^2 (T_e + T_i)}} \quad (11)$$

a jól ismert karakterisztikus Debye-távolságot jelenti. Jó közelítésben ez a lineáris mérete kis szondapotenciálok esetén a szonda és a plazma közötti átmeneti tértöltés-rétegnek.

Amennyiben a [7] egyenlőtlenség nem áll fenn, úgy általános esetben a [8] összefüggés alapján adható meg a tértöltés koncentrációja és a szondapotenciál közötti összefüggés, a plazma potenciáljához képest vett szondapotenciál előjelétől függően. A pozitív szonda (kisülési tér potenciáljához képest) esetén:

$$\nabla^2 V = -4\pi e \left[n_0 e^{-\frac{eV}{kT_i}} - n_e(V) \right]. \quad (12)$$

Negatív szonda esetén

$$\nabla^2 V = -4\pi e \left[n_i(V) - n_0 e^{-\frac{eV}{kT_e}} \right]. \quad (13)$$

A (12) és a (13) összefüggésben szereplő $n_e(V)$ ill. az $n_i(V)$ függvényeket külön meg kell határozni. E meghatározáshoz segítségül szolgál az a feltétel, hogy a kisülési térbe benyúló szondát lehetőleg úgy választjuk meg, hogy az a töltéshordozók közepes szabad úthosszához képest kisméretű legyen, s így a kisülési térben számottevő zavart ne okozzon. Ennek megfelelően a szonda átmérője (speciális alakú szondáknál a legnagyobb geometriai jellemzője) jóval kisebb, mint az elektronok, vagy ionok közepes szabad úthossza, s így a plazma potenciáljához képest alacsonyabb

potenciálon levő szondára jutó áram a töltéshordozók előjelétől függetlenül, a gáz-kinetikai megfontolások alapján (7.10)

$$i_s = \frac{1}{4} e \cdot n \bar{v} \cdot S \quad (14)$$

lesz, ahol \bar{v} a töltéshordozók számtani középsebessége, S a szonda aktív, töltéshordozókat felfogó felülete.

Ezek felhasználásával számolhatók a szondakarakterisztika egyes szakaszainak jellemzői.

2. A környező kisülési tér potenciáljához (plazmapotenciálhoz) képest negatív szonda. Retardáló tér az elektronokra nézve

Ha a szonda potenciálja az azt körülvevő kisülési tér (vagy plazma) potenciáljához képest sokkal alacsonyabb, akkor azt pozitív ionokból álló tértöltésréteg veszi körül (2. ábra AB szakasz). A szonda elektromos tere fékezi a random mozgásuk során arra haladó elektronokat, s így ezek csak kevésbé, vagy igen nagy szonda-feszültségek (negatív értelemben) esetén egyáltalában nem jutnak már a szondáig.

Jó közelítéssel azt lehet mondani, hogy a szonda az elektronokat mind eltaszítja magától, s csak a tértöltés által limitált ionáramot veszi fel. A szondát körülvevő pozitív töltéshordozók alkotta rétegben erősen negatív szonda esetén negatív töltéshordozók tehát nem léphetnek fel, ott gerjesztés, ionizáció nem alakulhat ki, s e réteg emiatt gyakran szabadszemmel is megfigyelhetően sötét marad. Ilyen módon közelítőleg megbecsülhető a tértöltési réteg vastagsága. A mérések szerint [2] a tértöltési réteg vastagsága függ a szonda potenciáljától és a szondán lefolyó áramtól. Ugyanakkor bizonyos fokig függ az elektronok átlagos energiájától, valamint koncentrációjától is.

Ha a szonda potenciálja elég alacsony a környező kisülési teréhez képest és az azt körülvevő tértöltési réteg d vastagsága elég kicsi, úgy feltehető, hogy az összes, szondára ütköző pozitív töltéshordozót a szonda fel tudja fogni reflexió-mentesen, az — ezekre a töltéshordozókra nézve — perfekt abszorbernek tekinthető. Ha elektronok nem lépnek ki a szonda felületéről, valamint a tértöltési rétegben nem játszódik le kölcsönhatás, ionizáció stb. a kezdetben tett feltételek értelmében, úgy a szondán lefolyó áram a (14) összefüggés alapján

$$i_s \approx i_i, \quad i_i = \frac{1}{4} e \cdot n_i \bar{v} \cdot S \quad (15)$$

formában adható meg, ahonnan a szondára jutó áramsűrűség számolható

$$j_i = \frac{1}{4} e \cdot n_i \bar{v} \quad (16)$$

Az ismeretes tértöltési összefüggésből (2) kiindulva megadható a szondát körülvevő tértöltési réteg és a szonda potenciálja közötti összefüggés sík szonda esetében, a kezdeti ionsebességek figyelembevételével:

$$j_i = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m_i}} \cdot \frac{V^{\frac{3}{2}}}{d^2} \left(1 + \frac{2,66}{\sqrt{\eta}} \right), \quad (17)$$

ahol

$$\eta = \frac{eV}{kT_i} \quad (18)$$

és V a szonda kisülési térhez viszonyított potenciálját jelöli. Látható, hogy a tértöltési réteg vastagsága a szonda potenciáljának $3/4$. hatványával, s a szondára jutó áram-sűrűség $1/2$. hatványával arányos.

Hengeres szonda esetén ezen összefüggés némileg bonyolódik [2], itt bejön az összefüggésbe a hengeres szonda l palástmagassága, valamint az r szondasugár és a d tértöltési réteg sugár hányadosa:

$$i = \frac{14,86 \cdot 10^{-6}}{\sqrt{\frac{m_i}{m_e}}} \cdot \frac{l}{r} \frac{V^{\frac{3}{2}}}{\beta^2} \left(1 + \sqrt{\frac{T_i}{1640 \cdot V}} \right), \quad (19)$$

ahol

$$\beta = \gamma - 0,4\gamma^2 + 0,09167\gamma^3 - 0,01424\gamma^4 + 0,00168\gamma^5 \quad (20)$$

ahol

$$\gamma = \log \frac{r}{a}, \quad (21)$$

ahol a a tértöltési réteg sugara.

Gömbszondánál az r szonda-sugár és az a tértöltési réteg-sugár hányadosa jön be:

$$i = \frac{4\sqrt{2}}{9} \sqrt{\frac{e}{m}} \frac{V^{\frac{3}{2}}}{\alpha^2} \left(1 + 0,0247 \sqrt{\frac{T_i}{V}} \right), \quad (22)$$

ahol

$$\alpha = f\left(\frac{r}{a}\right) \quad (23)$$

közelítőleg

$$\alpha^2 = \gamma^2 - 0,6\gamma^3 + 0,24\gamma^4 - 0,074\gamma^5 + \dots \quad (24)$$

ahol a γ értékét a (21) összefüggés definiálja.

Az itt bemutatott összefüggések megfelelő helyettesítések után jól alkalmazhatók a különböző szondapotenciáloknál adódó tértöltési rétegvastagságok meghatározására.

A kisülési térhez képest negatív szonda esetén sík szondáknál a két különböző úton nyert (16) és (17) összefüggés összevetésével egyes adatok ismeretében számolható pl. a tértöltési réteg vastagsága, vagy az ion-hőmérséklet:

$$j_i = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m_i}} \frac{V^{\frac{3}{2}}}{d^2} \left(1 + \frac{2,66}{\sqrt{\frac{eV}{kT_i}}} \right) = \frac{1}{4} en_i \bar{v}_i. \quad (25)$$

A (25) összefüggésben mérhető a j_i , V és esetleg a d értéke, m_i pedig ismert. Ha $n_i = 10^{12}$ ion/cm³, és az

$$\frac{1}{2} m_i \bar{v}_i^2 = 0,1 eV \quad (26)$$

azaz kb. háromszorosa a szobahőmérsékleten adódó termikus energiának, úgy higanygőzkisülések esetén a higany ionok átlagos sebessége

$$\bar{v}_i = 3 \cdot 10^4 \frac{\text{cm}}{\text{sec}}. \quad (27)$$

Ha a $V = -81$ V, úgy a fenti adatok felhasználásával $d = 2,8$ mm-nek adódik [1]. Ez adja a kisülési térben levő szonda körüli sötét tértöltési réteg vastagságát. Az előző összefüggések értelmében ez láthatóan összefügg a szondajellemzőkkel, valamint a vizsgált kisülési tér töltéshordozóinak tulajdonságaival.

Ha a szonda potenciálja nő, közeledik a plazma potenciáljához, úgy egy bizonyos potenciálértéktől kezdve már néhány nagyenergiájú elektron is beleütközik bizonyos valószínűséggel a szondafelületbe. Ezek nagy energiájuk révén a retardáló téren át is eléri random mozgásuk során a szondát. Így ez esetben a szondaáramot már a pozitív ionáram és az ilyen módon adódó elektronáram összege teszi ki:

$$i_s = i_i - i_e \quad (28)$$

ahol i_e a szondára jutó elektronok árama. Élve a kiinduló feltételezésekkel, ez esetben azzal, hogy az elektronok a tértöltési rétegben kölcsönhatások, ütközések során nem veszítenek energiájukból, azt lehet mondani, hogy a (28) szerinti i_e elektronáramot az elektronok adott energiaeloszlási függvénye révén jellemezni lehet. Feltételezve a Maxwell—Boltzmann eloszlást, az S felületű szondára egységnyi idő alatt X irányból v_x és $v_x + dv_x$ sebességgel ütköző elektronok száma

$$\delta_x = \frac{S \cdot n_{e_x} \cdot v_{e_x}}{4} = \frac{1}{4} n_e \bar{v}_{e_x} \cdot \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{v_{e_x}^2}{\alpha^2}} dv_{e_x} \quad (29)$$

Ezen elektronok közül csak azok jutnak el adott V szondapotenciálnál a szondáig, amelyek sebességének x komponensére fennáll

$$\frac{1}{2} m_e v_i^2 \geq e V_{e_x} \quad (30)$$

A szondára jutó összes elektronokból álló áram a (V_k, ∞) határok közötti integrál útján adható meg:

$$i_e = \frac{S \cdot e \cdot n_e}{4 \sqrt{\pi}} \cdot \int_{V_k}^{\infty} \frac{V_{e_x}}{\alpha} e^{-\frac{V_{e_x}^2}{\alpha^2}} dv_{e_x} = \frac{e \cdot n_e \cdot S}{2 \sqrt{\pi}} \alpha \cdot e^{-\frac{V_k^2}{\alpha^2}}, \quad (31)$$

ahol

$$\alpha^2 = \frac{2kT_e}{m_e} \quad (32)$$

és a

$$V_k = \sqrt{\frac{2eV}{m_e}} \quad (33)$$

Az áramsűrűség a (31) összefüggés alapján

$$j_e = \frac{i_e}{S} = e \cdot n_e \cdot \sqrt{\frac{kT_e}{2\pi m_e}} e^{-\frac{eV}{kT_e}} \quad (34)$$

Amennyiben az elektronok energiaeloszlása nem a Maxwell—Boltzmann energiaeloszlás, úgy az

$$\frac{n_e}{\alpha \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{v_{e_x}^2}{\alpha^2}} dv_{e_x}$$

kifejezés az $n_e f(v_x) \cdot dv_x$ kifejezéssel helyettesítendő. Itt az $f(v_x)$ adja a szóban forgó energiaeloszlási függvényt implicit alakban. Az integráció eredménye ezen eloszlási függvény jellegétől függően általában eltér az itt ismertetettől. Feltételezve a Maxwell–Boltzmann eloszlást, valamint azt, hogy a T_e és az n_e értéke független a V szondafeszültség változásától, a (34) összefüggés logaritmizálásával

$$\log j_e = B - \frac{eV}{kT_e} \quad (35)$$

alakú kifejezés adódik, ahol

$$B = \log \left[e \cdot n_e \sqrt{\frac{k \cdot T_e}{2\pi m_e}} \right] \quad (36)$$

Ábrázolva a (35) szerinti

$$\log j_e = f(V)$$

függvényt, egy egyenes adódik, amely a (36) egyenlettel definiált B pontban metszi a $\log j_e$ tengelyt. Innen B értéke adható meg.

Ugyanakkor további jól használható összefüggés nyerhető a (35) egyenlet V szondapotenciál szerinti differenciálhányadosának képzésével

$$\frac{d \log j_e}{dV} = \frac{d \log j_e}{dV_s} = -\frac{e}{kT_e}, \quad (37)$$

ahol az e és k ismert konstansok, a T_e értéke így innen számítható; a V értéke voltokban, a j_e értéke A/cm^2 -ben adandó meg. Ha úgy választjuk meg a számolásnál felvett kiindulási pontokat, hogy a köztük levő áramsűrűség logaritmusának különbsége egységnyi legyen ($\Delta \log j_e = 1$), úgy az elektronhőmérséklet értéke a

$$T_e = 1,17 \cdot 10^4 \Delta V \quad (38)$$

összefüggés alapján közvetlenül megadható.

Az elektronhőmérséklet értéke grafikus úton is számolható, lényegében ehhez hasonló módon [7]. A 2. ábrán feltüntetett szondakarakterisztika C pontja felé közeledve exponenciálisan nő az elektronáram komponens, míg az ionáram komponens a szonda növekvő potenciáljával csökken. A szondán lefolyó összáram a (28) összefüggés értelmében ezek eredőjeként alakul ki:

$$i_s = A \cdot e^{-\frac{eV}{kT_e}} + B \cdot V^{\frac{3}{2}}, \quad (39)$$

ahol A, B konstansok. A (39) egyenletben szereplő második tag a telítési jellegű ionáram tag. Jó közelítéssel úgy képzelhető el a plazma-átmeneti tértöltési réteg határa, mint egy effektív töltéshordozó emitter [7]. Az emitterből kilépő elektronok

sebessége $\sqrt{\frac{2T_e}{m_e}}$ -vel arányos, i_e árama

$$i_e \approx i_s - i_{i0}, \quad (40)$$

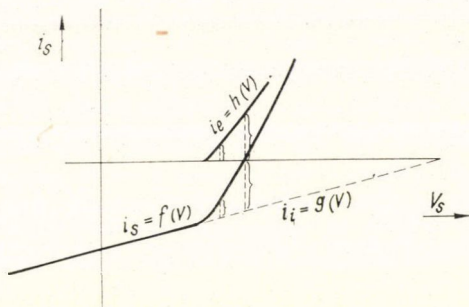
ahol i_{i0} a telítési ionáram. Innen a (37) egyenlet alkalmazásával

$$\frac{T_e}{e} \approx \frac{1}{\frac{d \log (i_s - i_{i0})}{dV}}. \quad (41)$$

Ezen megfontolás alapján grafikusán a következő módon adható meg a T_e elektronhőmérséklet értéke: a 2. ábrán feltüntetett szondakarakterisztika C pontjában a szondára jutó ionáram és elektronáram összege 0, tehát itt

$$i_e = i_i. \quad (42)$$

Lineárisan extrapolálva — az egyébként is lineáris menetű — ionáram-görbe nagyobb szondafeszültségekhez tartozó pontjai megadhatók. Az $i_s = f(V)$ és a $i_i = g(V)$ függvények pontonkénti kivonásával nyerhető, a 3. ábrán bemutatott $i_e = h(V)$



3. ábra. Az $i_e = h(V)$ függvény meghatározása az $i_s = f(V)$ és az $i_i = g(V)$ függvényekből, grafikus úton végzett kivonással:
 $i_e = h(V) = f(V) - g(V)$

függvény. Ezen függvények független változója a szondafeszültség. A számított pontok számát eléggé sűrítve kielégítő pontossággal (az eddig elkövetett hibánál nem nagyobb hibával) megadható az $i_e = h(V)$ görbe, amelyben az előzőek alapján szerepel a T_e elektronhőmérséklet értéke, ahonnan ez az előzőekhez hasonlóan számolható is. Az itt alkalmazott lineáris extrapolálás nem a legszerencsésebb variáns, mégis esetenkénti alkalmazása célszerű, mivel a számítások menetét nagymértékben leegyszerűsíti [7].

Bizonyos esetekben, más jellegű számításoknál további speciális paraméterek megadásához is szükséges az elektronáram

és az ionáram szétválasztása, amely az itt ismertetett módszer segítségével grafikus úton gyorsan elvégezhető.

Negatív szonda esetén — a plazma potenciáljához képest véve —, általános esetben a tértöltési összefüggés alakja, ami a (13) egyenlet levezetésénél már szóba került:

$$\Delta^2 V = 4\pi n_0 e \frac{eV}{kT_e} - 4\pi \cdot n_i(V), \quad (43)$$

ahol V a szonda és a plazma közötti potenciálkülönbséget jelenti. Ezen összefüggésből kiindulva Bohm adott meg negatív szondák esetében alkalmazható módszert [8], amellyel erős mágneses tér jelenlétében is reális eredményeket adó szondamérések végezhetők. A módszer kidolgozására az adott lehetőséget, hogy az ionok mozgását kis áramsűrűségek esetén a mágneses tér még nem zavarja számottevően. Sokkal erősebben kimutatható a mágneses tér hatására beálló változás az elektronok mozgását tekintve. Így a Langmuir-féle szondakarakterisztika ionáram szakasza mágneses tér jelenlétében sem szenved torzulást, míg az elektronáram szakasz jellege megváltozik, nem marad áttekinthető és kiértékelhető.

A (43) összefüggés, ami lényegében a (13) összefüggés egy másik formája, s ismételt leírását csak a jelenlegi diszkusszió tette szükségessé, fizikailag a 4. ábrán látható módon interpretálható. Az Y tengelyre az n_e , ill. n_i elektron-, ill. ionkoncentrációk vannak felvéve, valamint a zavartalan plazmában, kvázineutralitást feltételezve az $n_0 = n_e = n_i$ töltéshordozókoncentráció fix egyensúlyi értéke. Az X tengelyre a különböző távolságok vannak felvéve. Az ábrán r_s jelöli a szonda sugarát, d a szondát körülvevő tértöltés-réteg vastagságát.

A szonda közvetlen közelében, ahol a

$$V_s(r) \gg \frac{kT_e}{e}$$

gyakorlatilag nincsenek elektronok, az n_e értéke nullának vehető. Olyan r távolságban kezdnek megjelenni az elektronok, amelyre nézve a

$$V_s(r) \approx \frac{kT_e}{e}$$

fennáll. Ez azt jelenti, hogy az r_s és d közötti átmeneti tartományban, a tértöltési tartományban fellépő feszültségesést a pozitív tértöltések adják. A szondától távolodva nő az n_e elektronkoncentráció értéke, az n_i ionkoncentráció pedig miután a szonda tere már kevésbé érződik, az n_0 érték felé csökken, s egy bizonyos távolságon túl már gyakorlatilag ismét kvázineutrális, perturbálatlan plazmáról lehet beszélni.

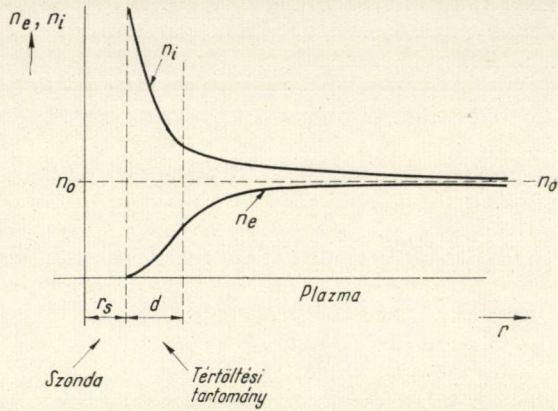
A szonda r_s sugarának méreteit az előzőek értelmében a közepes szabad úthossz nagyságától függően kell megválasztani, míg a d tértöltési réteg vastagsága a (19), (20), (21) összefüggések alapján határozható meg. Általában fennáll

$$r_s \gg d - r_s. \quad (44)$$

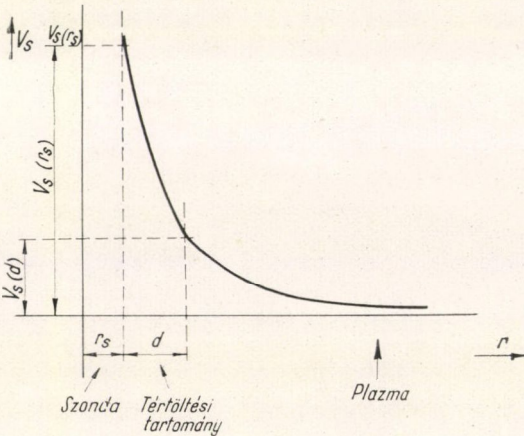
A (43) összefüggés alapján számolva a 4. ábrán bemutatott $n_e = n_e[V_s(r)]$ és $n_i = n_i[V_s(r)]$ -nek megfelelően a $V_s(r)$ szondapotenciál térbeli lefutását, távolságfüggését az 5. ábra mutatja. Az alkalmazott jelölések az előzőekkel egyezők. A szonda közvetlen közelében a potenciál nagysága $V_s(r_s)$, s erről az értékről csökken le meredeken a d sugarú tértöltési rétegen át a $V_s(d)$ potenciál értékig, amely még mindig jól mérhető, nagysága:

$$V_s(d) = \frac{kT_e}{e}. \quad (45)$$

A szondától d távolságban már jelentősen csökken a pozitív tértöltés koncentrációja, nő az elektronkoncentráció, kezd a kvázineutralitás



4. ábra. Az n_e elektron- és az n_i ionkoncentráció helyfüggése a szondakörüli tartományban



5. ábra. A potenciállefutás a szonda környezetében

helyreállni, a szondapotenciál értéke tovább csökken, $V_s(\infty) \rightarrow 0$. A kisülési térhez képest negatív szonda esetén lejátszódó folyamatok részletes értelmezése a külső mágneses tér jelenlétében elvégzendő szondamérések diszkutálása miatt fontos.

Az itt ismertetett tárgyalásmód csak a fontosabb eredményeket öleli fel. A negatív szonda esetén alkalmazható részletes elméleti leírást már *Langmuir* elvégezte [2], sík, hengeres és gömbszondák esetére, figyelembe véve a különböző irányú sebességkomponenssel rendelkező töltéshordozók mozgását, random mozgásokra szuperponált drift mozgását, sebességeloszlását, valamint a szondakörüli térben levő elektronok fékezési mozgását. A jelenségek leírásánál két út állt rendelkezésre [2], a tisztán mechanikai problémaként való tárgyalás és a tértöltési viszonyok alapján lehetséges leírás. Mindkét módon azonos eredmények adódnak. E részletesebb tárgyalás fizikai szempontból érdekes, azonban új és használható motívumokat nem szolgáltat a szondamérés elvégzéséhez. Megemlítendő, hogy ideális szonda esetén a 2. ábra szerinti karakterisztika *AB* szakaszának, a telítési szakasznak az *X* tengellyel párhuzamosnak kellene lennie az itt levezetett összefüggések alapján. Ez azonban általában az *X* tengellyel bizonyos szöget zár be, azaz a fokozódó negatív szondafeszültséggel általában még mindig nő a telítési ionáram is. E jelenség kísérleti vizsgálata során bebizonyosodott, hogy ennek magyarázata a szonda véges kiterjedése miatt az annak határain, szélein fellépő folyamatokra vezethető vissza [11].

A fali potenciál

Amennyiben a szondára jutó negatív feszültség értéke csökken, azaz a szondapotenciál és a kisülési tér vizsgált pontjabeli potenciál közötti különbség csökken, úgy egyre több elektron jut a szondára; az előzőek értelmében a szondára jutó elektronáram *e* feszültségsökkenéssel exponenciálisan nő.

Bekövetkezik egy olyan állapot, egy adott V_f szondapotenciálnál, amikor a szondán nem folyik áram, azaz az elektronáram komponens nagysága megegyezik az ionáram komponenssel. Ez a 2. ábrán bemutatott ideális szondakarakterisztika *C*-vel jelölt pontjában áll elő. Meg kell jegyezni, hogy ez nem azt jelenti, hogy ekkor a szonda potenciálja a kisülési tér potenciáljával azonos. A V_f szondapotenciál *e* pontban kisebb a környező perturbálatlan kisülési tér potenciáljánál.

Az a tény, hogy ez esetben az elektronáram a fennálló fékező szonda-erőtér ellenére is az ionárammal azonos nagyságú, az alábbi módon magyarázható: a szondára jutó ionáram az előzőekben tárgyalt tértöltési egyenletekből levezethető tértöltés által limitált érték. Az elektronáramot a diffúziós viszonyok szabják meg, az tisztán diffúziós jellegű [1]. Az átlagos elektronenergiák általában jóval nagyobbak, mint az ionenergiák. Az elektronok plazmában való ütközések révén (atom, vagy molekula partnerrel) adódó energiavesztesége legfeljebb $f_e = 10^{-2}$, míg az ionok ütközési vesztesége $f_i = 0,3$ (szintén atom, vagy molekula partnerrel) [1]. Ugyanakkor az elektronok kis tömegük révén az ionokhoz képest nagy random sebességgel rendelkeznek, s *e* rendezetlen, diffúzió megszabta mozgásuk során el tudják érni a számukra fékezőtérben levő szondafelületet, mégpedig nagyobb számban, mint a random mozgást végző pozitív ionok. Ennek következtében adódik, hogy a V_f fali potenciál értéke alacsonyabb, mint a plazmapotenciál. Ezt az állapotot az „izolált szonda” állapotának is szokás nevezni [2].

Az izolált szonda állapotában szonda körül végbemenő diffúziós jelenségek és mozgási problémák az ambipoláris diffúziós összefüggésekből kiindulva tárgyalha-

tók [2]. Kimutatható, hogy a falra, vagy szondára, normális viszonyok között mintegy három nagyságrenddel nagyobb sebességgel érkeznek az elektronok, mint az ionok, valamint bebizonyítható, hogy a falhőmérséklet főleg a fali rekombinációs folyamatok miatt általában magasabb, mint a kisülés közepén, a plazmában fellépő hőmérséklet [1]. Természetesen itt szilárd falról van szó, nem pedig mágneses palackról, vagy mágneses tükörről.

A fali potenciál általában néhány (1–5) voltal alacsonyabb, mint a környező kisülési tér potenciálja (plazmapotenciál). Itt ez esetben a fali potenciál a többé-kevésbé ionizált gáztér és a kisülési csőfal kontaktusa során alakul ki, de ilyen jelenséggel lehet találkozni több más helyen is, pl. szilárdtestfolyadék, folyadék-folyadék, vagy szilárdtest-szilárdtest határok esetén is. Amennyiben az eredeti, előzőekben tárgyalt kikötések teljesülnek, s a töltéshordozók ez esetben a szondafelülettel, mint falrészsel nem lépnek reakcióba, úgy a diffúziós jelenségek tárgyalása a többi itt ismertetett határfelületek esetén adódó viszonyokhoz képest egyszerűsödik.

Miután a V_f potenciálú szonda esetében a $i_s = 0$, az előzőek értelmében $i_e = i_i$, s így

$$i_i = \frac{1}{4} e \cdot n_i \cdot \bar{v}_i = \frac{1}{4} e \cdot n_e \bar{v}_e \cdot e^{-\frac{eV_f}{kT_e}} = i_e \quad (46)$$

s fenntartva a kvázineutralitást ez esetben is, ezen (46) összefüggés a

$$V_f = \frac{kT_e}{e} \log \frac{\bar{v}_e}{\bar{v}_i} = \frac{kT_e}{2e} \log \frac{T_e \cdot m_i}{T_i \cdot m_e} \quad (47)$$

formában egyszerűbb alakban írható fel explicite kifejezve a fali potenciál értékét.

Higanygőzkisülés esetén ha a $T_e = 2000^\circ\text{K}$ (kb. 0,2 eV) és a $T_i = 400^\circ\text{K}$, miután ez esetben az $m_i/m_e = 1836200$, a fali potenciál értéke $V_f = -2,46$ V-nak adódik [1]. Az itt felhozott példák mind nikkal felületű szonda és higanygőzkisülés esetére vonatkoznak. Ennek oka az, hogy a vizsgálatok szerint [9] a negatív nikkal anyagú szonda higanygőzkisülésben nem emittál elektronokat. Minden más anyagú szonda, bármely más gázzal ez esetben többé-kevésbé számottevő elektronemissziót ad. Esetenként szokás ezért a negatív (környező kisülési térhez képest) szondát, mint katódot felfogni, s az előtte levő tér pozitív tértöltésekből álló sötét terét pedig mint katód sötét teret kezelni [9], s a vizsgálatokat ilyen analógia alapján lefolytatni.

A fali potenciállal bíró szonda esetén is ki lehet terjeszteni a tárgyalást olyan esetekre, amikor a töltéshordozók, főleg a negatív töltéshordozók speciális mozgása is figyelembe van véve, így többek között az az eset is, amikor a töltéshordozók egy része belép ugyan a szonda terébe, de random mozgása során nem ütközik a szondára, pályája elgörbült, elkerüli a szondát (orbital motion) [2].

A környező kisülési térrel (plazmával) megegyező potenciálú szonda

Amennyiben a szonda potenciálja tovább növekszik, közeledik a kisülési tér, vagy plazma potenciáljához, úgy az előzőekben levezetett egyenletekből láthatóan, csökken a szondát körülvevő tértöltési réteg vastagsága, s csökken az ionáram értéke, s ennek nagyságát a diffúziós folyamatok kezdik megszabni. Ugyanakkor

mindaddig, míg a szonda potenciálja a plazma potenciálját el nem éri, az elektron-áram értéke exponenciálisan nő, a fennálló energiaszétosztási függvénynek megfelelően. A szondakarakterisztika ezen szakasza a 2. ábrán feltüntetett \overline{CD} szakasznak felel meg, ha az elektronok sebességeloszlása valóban megfelel a Maxwell—Boltzmann sebességeloszlásnak. A szondakarakterisztika D pontjánál egy könnyök látható. E pontban a szonda potenciálja megegyezik a környező kisülési tér potenciáljával, itt

$$e^{-\frac{eV}{kT_e}} = 1, \quad (48)$$

mivel a V a kisülési tér potenciáljához viszonyított szondapotenciál ez esetben 0. E pontban eltűnik a pozitív tértöltési réteg, a szonda mintegy közvetlenül érintkezik a plazmával, „bemerül” a kisülési térbe. A tértöltési réteg eltűnésével a szabad diffúziós áramlás töltéshordozó árama éri a szondafelületet, ami az elektronok és ionok számottevő sebességkülönbsége miatt a többlet negatív töltéshordozókból eredő „negatív” áramot biztosít.

A számítások szerint e pontban a fellépő ionáram nagysága elhanyagolható az elektronáraméhoz képest. Miután a szonda potenciálja megegyezik a kisülési tér potenciáljával, ezen állapotban sebességétől függetlenül bizonyos találati valószínűséggel minden elektron elérheti diffúziós áramlása során a szondát.

A kialakuló elektronáram

$$i_{e0} = e \cdot n_e \cdot S \sqrt{\frac{k \cdot T_e}{2\pi \cdot m_e}}, \quad (49)$$

a pozitív ionok diffúziós árama pedig

$$i_{i0} = e \cdot n_i \cdot S \sqrt{\frac{k \cdot T_i}{2\pi \cdot m_i}}. \quad (50)$$

Mindkettő számítása (14) egyenlet alapján történt, behelyettesítve a Maxwell—Boltzmann eloszlás feltételezéséből számolt

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k \cdot T}{\pi \cdot m}} \quad (51)$$

számítási középsebesség elektronokra és ionokra vonatkozó értékét.

A 2. ábra szerinti \overline{CD} szakaszon a szonda által felvett áram jellemző az elektronok sebességeloszlására, ezen elektronok, amelyek a szondára jutottak, a szonda csökkenő fékező-terét győzték le. Az elektronkoncentrációra jellemző az e szakaszban szondára jutó elektronok száma. Ha n'_e jelöli a szonda előtti térben levő elektronok koncentrációját, úgy a Maxwell—Boltzmann eloszlás alapján

$$n'_e = n_e \cdot e^{-\frac{eV}{kT_e}} \quad (52)$$

adja ezen elektronok koncentrációját, ahol V ismét a szonda kisülési térhez képest vett potenciálja. Innen

$$i'_e = j'_e \cdot S = \frac{1}{4} e \cdot n'_e \cdot \bar{v}_e \cdot S = \frac{1}{4} e \cdot n_e \cdot \bar{v}_e \cdot S \cdot e. \quad (53)$$

Véve ennek a logaritmusát:

$$\log i'_e = \log \left(\frac{1}{4} e \cdot n_e \cdot \bar{v}_e \cdot S \right) - \frac{eV}{kT_e}, \quad (54)$$

vagy bevezetve a Briggs-féle logaritmust

$$2,303 \cdot \log_{10} i'_e = \text{konst} - \frac{e}{kT_e} V. \quad (55)$$

Ha tehát a szondaáram logaritmusa a szondafeszültség függvényében van ábrázolva, úgy ideális esetben egy egyenes szakasznak kell kiadódnia Maxwell—Boltzmann eloszlásnál, a 2. ábra szerinti CD szondafeszültség tartományban. Ennek M meredeksége az (55) egyenlet szerint

$$M = - \frac{e}{kT_e}. \quad (56)$$

A szondafeszültséget V -ban kifejezve ($1 \text{ V} = 1/300 \text{ ESE}$):

$$2,303 \log_{10} i'_e = \text{konst} - \frac{e}{300k} \cdot \frac{1}{T_e} V \quad (57)$$

$$2,303 \log_{10} i'_e = \text{konst} - \frac{11600}{T_e} \cdot V \quad (58)$$

adódik. Innen figyelembe véve, hogy a D pont közelében már a pozitív ionok árama elhanyagolható az elektronok diffúziós áramához képest, azt lehet venni, hogy az

$$i_e \approx i_s \quad (59)$$

Az (58) és (59) összefüggések alapján a \overline{CD} egyenes szakasz hajlásszögéből könnyen meghatározható a T_e értéke:

$$\frac{2,303 \Delta \log_{10} i_s}{\Delta V_s} = \frac{11600}{T_e}, \quad (60)$$

ahol a $\Delta V_s = \Delta V$, mivel a plazmapotenciál értéke a különbségképzésnél kiesik. A V_s valamelyik fix, referencia elektródához, vagy Földhöz viszonyított potenciálérték, ami műszeren közvetlenül leolvasható, az i_s értéke ugyancsak műszerrel közvetlenül megadható. A számításoknál azok gyorsítása érdekében célszerű a ΔV_s értéket 1 V -nak választani.

Amennyiben a T_e értéke ilyen módon már ismert, úgy az (51) összefüggésből a \bar{v}_e számolható, majd ennek felhasználásával az (53) egyenletből az n_e elektron-koncentráció értéke határozható meg, s ezzel a mikrofizikai paraméterek egész sora számítható.

A szonda a plazmapotenciálnál perfekt abszorbere (11) a diffúziós áramlás révén odaérkező töltéshordozóknak, s a 2. ábra szerinti D pontban látható törés nemcsak az exponenciális elektronáram növekedés végét jelzi, hanem azt is, hogy a szonda körüli tér jellege megváltozik. Az eddig elektronokra nézve fékező, retardáló tér itt csap át gyorsító térbe. E pontban azonban még semmilyen, szonda által előidézett térről nem lehet beszélni, annak potenciálja a környező tér potenciáljával azonos. Az $e(D)$ pontbeli állapot egy indifferens középállapotnak fogható fel.

Az itt ismertetett számítások elvégzésénél is figyelembe kell venni, hogy a különböző alakú szondák áramfelvevő felülete különböző nagyságú és jellegű. Ezt megfelelő korrekciós faktorok vagy függvények alkalmazásával lehet biztosítani (12). Ezen korrekciós függvények hengeres és sík szondák esetére az irodalomban (12) részletesen ismertetve vannak, s a szondasugár és a tértöltési sugár hányadosaként vannak előállítva.

A pontos számításoknál figyelembe kell venni a random mozgást végző töltéshordozók szondára ütdésének valószínűségét is. Ez szintén egy függvény formájában adható meg, amely a szóban forgó töltéshordozó energiáját is tartalmazza, mint független változót (12). A számítások és mérések módját minden esetben befolyásolja a megkövetelt pontosság és a vizsgálat jellege, célja. Ezek részletes tárgyalására a továbbiakban kerül sor a szondamérési módszer kísérleti tárgyalásánál.

A kisülési térhez (plazmához) képest pozitív szonda

Ha a szonda potenciálja a körülötte levő kisülési térhez (plazmához) képest nő, úgy ismét kialakul a szonda körül egy tértöltési réteg, ezúttal azonban elektronokból. A szondára jutó elektronáram és ionáram is megszűnik diffúziós jellegűnek lenni. Ha a szonda csak néhány tized voltal pozitívabb, mint a környezete, úgy a kísérletek szerint a pozitív ionokból álló diffúziós áram is már csaknem teljesen eliminálódik (1).

A szonda körül kialakuló, negatív töltéshordozókból álló tértöltési réteg folyamatai eltérnek a pozitív ionokból álló tértöltési réteg esetén végbemenő, előzőekben tárgyalt jelenségektől, amelyek negatív szondapotenciálnál alakulnak ki (1). A negatív töltéshordozók árama az

$$i_e = \frac{1}{4} e \cdot n_e \bar{v}_e \cdot S \quad (61)$$

összefüggés alapján számolható:

$$i_e = e \cdot S \cdot n_e \sqrt{\frac{kT_e}{2\pi m_e}} = \frac{2}{9} \cdot S \sqrt{\frac{2e}{m_e} \cdot \frac{V^{\frac{3}{2}}}{d_e^2}} \quad (62)$$

az áramsűrűség

$$j_e = \frac{9}{2} \sqrt{\frac{2e}{m_e} \cdot \frac{V^{\frac{3}{2}}}{d_e^2}}, \quad (63)$$

ahol d_e jelenti az elektronokból kialakuló tértöltés vastagságát sík szonda esetében.

Megjegyzendő, hogy a (62) összefüggésben szereplő e/m_e lényegesen nagyobb, mint ugyanezen hányados egyszeresen ionizált atomok esetében e/m_i , ezért várhatóan nagyobb tértöltési vastagságok adódnak ezesetben, mint a negatív szondát körülvevő pozitív tértöltési tartománynál [17].

A szondakarakterisztika \overline{DE} szakaszán a szondára folyó áramot — amely túlnyomó részben elektronáramból áll — a tértöltés limitálja, azonban itt is, mint az ionáram telítési szakaszánál a szonda véges kiterjedése miatt fellépő kerületi, vagy határjelenségek torzítják a karakterisztikát. Ilyen szempontból ideális szondakarakterisztikát csak végtelen nagyfelületű szondáknál lehetne remélni, ahol a szonda-felületek szélein fellépő folyamatok magán a szonda-felületen fellépő folyamatokhoz (áramfelvétel stb.) képest elhanyagolhatók lennének.

Általában kisfelületű szondákat szokás alkalmazni, hogy ezáltal minél kisebb legyen a vizsgált kisülési térben keltett zavar, azonban sík szondáknál, kis szonda-felületeknél igen számottevő a szélek miatti karakterisztika torzulás.

Ennek elkerülésére az előzőek során már említett kifelületű hengeres és gömb-szondákkal indultak meg a kísérletek, amelyek e szondatípusok előnyös tulajdonságait és jó használhatóságát támasztották alá. Természetesen, mint az előzőekben erről már szó volt, ezen utóbbi szondatípusokkal való mérésnél korrekciós függvényeket kell alkalmazni. Ez alkalmazásukat illetőleg némi nehézséget jelent, azonban, mint a kísérleti tárgyalásnál a továbbiakban látható lesz, ezt a hátrányt kompenzálja e szondaalakok néhány előnyös tulajdonsága.

Ha a szonda potenciálja tovább nő, s sokkal magasabb potenciálra kerül, mint a környező kisülési tér, úgy a szondakarakterisztika jellege megváltozik, egy ponttól kezdve a szondafeszültség növekedtével az eddiginél fokozottabban nő a szondaáram (a 2. ábrán feltüntetett karakterisztika „E” pontjától kezdve). Ez az erős áramnövekedés a szonda körüli térben erősen felgyorsult elektronok ionizáló hatásának eredménye. A szonda környezetében, annak gyorsító tere miatt az elektronok az ionizáláshoz elegendő energiát vesznek fel, s az így létrejött szekunder elektronok is a szondára jutnak. Ezen folyamat egy adott szondafeszültségtől kezdve lavinászerűen megy végbe, s ebben a szakaszban a szonda által felvett áram már általában nagyságrendileg megegyezik a kisülési árammal, s ennek következtében erősen megváltoztatja a szonda körüli kisülési tér eredeti tulajdonságait.

Miután az előzőekben kikötött kölcsönhatási feltétel itt nem érvényesül, e szakasz vizsgálata nem is hoz újabb értékes adatokat, általában ennek felvételére a mérések során nem kerül sor. A kölcsönhatási kikötés szerint ugyanis a töltéshordozók között semmilyen energiakicserélődésnek nem szabad létrejönnie a szondát körülvevő tértöltési tartományban, mert ezáltal a mérendő kisülési viszonyok számottevően megváltoznának, az energiavesztések, koncentráció-változások révén. A 2. ábrán bemutatott szondakarakterisztika „E” pontjától kezdve a tértöltési tartományban ionizáció lép fel, de lehetséges, hogy ennél kisebb szondafeszültségnél is már néhány elektron olyan energiára tesz szert, hogy azzal ionizálni tud, de az ezek által létrehozott töltéshordozó többlet legfeljebb az ideális karakterisztika alaktól való eltéréshez járul hozzá. Mindenesetre, a karakterisztika ezen szakaszát („E” ponttól kezdődő szakaszt) már a számításokhoz nem szokás felhasználni, a \overline{DE} szakaszt is csak a plazmapotenciál meghatározásához lehet alkalmazni, s mint telítési áramszakaszból csak a legkritkább esetben szabad a fenti bizonytalanságok miatt következtetéseket levonni.

A szondakarakterisztika ionáram telítési szakasza (2. ábra \overline{AC} szakasz) és az elektronáram felfutási szakasz (2. ábra \overline{CD} szakasz) nyújtja a legtöbb és legmegbízhatóbb információt a vizsgált kisülési térről.

Az eloszlási függvény vizsgálata az elektronáram felfutási szakasz alapján

A 2. ábrán bemutatott ideális szondakarakterisztika \overline{CD} szakaszát szokás az elektronáram felfutási szakaszának nevezni, miután itt a környező kisülési térhez (plazmához) képest alacsonyabb potenciálon levő szondára jutó elektronáram az elektronok energiaceloszlásának megfelelően fokozatosan nő, mintegy felfut a szondapotenenciál növekedtével. Az előzőek során, a Maxwell—Boltzmann eloszlást feltevezve elvégzett számítások azt mutatták, hogy ezen a szakaszon az elektronáram a szondafeszültség növekedtével exponenciálisan nő, s ezen karakterisztika szakasz ideális esetben egyenes szakasszal reprezentálható, féllogaritmikus koordináta

rendszer alkalmazásánál. Ezen egyenes szakasz meredeksége a (37) egyenlet alapján:

$$\frac{d(\log j_e)}{dV} = -\frac{e}{kT_e}.$$

Az 1930-as években *Druyvesteyn* [13] szondaméréseket végzett alacsony-feszültségű oxidkátódos kisüléseknél, ahol azt találta, hogy az elektronáram felfutási szakasz nem egyenes, parabolikus jellegű, annak jellemzésére a következő összefüggést adta meg

$$\log j_e = D_1 - \left(\frac{eV}{kT_e} \right)^2, \quad (64)$$

ahol D , egy konstans érték. Ebben az esetben az energieloszlási függvényben olyan kitevőnek kell szerepelnie, amely

$$-\left(\frac{eV}{kT_e} \right)^2 \quad (65)$$

alakú. Ezeknek megfelelően az elektronáramfelfutási szakasz jellege valóban parabolikus. Mindenesetre azt lehet látni, hogy a szondakarakterisztika ezen szakasza érzékeny az eloszlási függvény alakjára, mint ez az itt végbemenő jelenségek diszkutálása alapján várható is. Ebből kiindulva kézenfekvő, hogy az egyes energieloszlások megállapításánál ezt a karakterisztikaszakaszt használjuk fel. Először *Druyvesteyn* határozott meg [13] energieloszlást az elektronáram felfutási szakasz alakjából.

Feltételezte, hogy a vizsgálandó eloszlási függvény alakja általánosan $f(\vec{v})d\vec{v}$ formában adható meg a \vec{v} , $\vec{v} + d\vec{v}$ sebességtartományban. Ekkor az előzőekben ismertetett úton megadható azon elektronok árama, amelyek a retardáló tér ellenére is eljutnak a szondára:

$$i_e = \frac{1}{2} eF \int_{\sqrt{\frac{2eV}{m_e}}}^{\infty} f(\vec{v}) d\vec{v} \int_0^{\vartheta} \vec{v} \cos \varrho \cdot \sin \varrho d\varrho, \quad (66)$$

ahol F a tértöltési réteg külső felülete, a plazma és a tértöltés határfelülete a szondától d távolságban. A v sebesség vektorsebesség, míg az előzőeknél csak a sebesség X komponensét vettük számításba a (31) összefüggéssel kapcsolatos levezetésnél. Itt (66) összefüggésnél φ a szondafelület normálisával bezárt szög, a második integrál tényező felső határára vonatkozólag a következő összefüggés áll fenn

$$\frac{1}{2} m_e \vec{v}^2 \cdot \cos \vartheta = eV. \quad (67)$$

A felületre merőleges sebesség komponens helyett a $v \cdot \cos \varphi \cdot \sin \varphi \cdot d\varphi$ áll. Az integrálást elvégezve adódik

$$i_e = \frac{e \cdot F}{4} \int_{\sqrt{\frac{2eV}{m_e}}}^{\infty} \vec{v} \cdot f(\vec{v}) \cdot d\vec{v} \left(1 - \frac{1}{\vec{v}^2} \cdot \frac{2eV}{m_e} \right). \quad (68)$$

Ezen $i_e = G(V)$ függvény a V szerint kétszer differenciálva adódik

$$\frac{d^2 i}{dV^2} = \frac{e^2 F}{4m_e} \cdot \frac{1}{V} \cdot f\left[\left(\frac{2eV}{m_e}\right)^{\frac{1}{2}}\right]. \quad (69)$$

A (69) kifejezés átrendezésével még jobban látszik az itt alkalmazott eljárás eredménye:

$$f\left[\left(\frac{2eV}{m_e}\right)^{\frac{1}{2}}\right] = \frac{4 \cdot m_e}{e^2 F} \cdot \frac{d^2 i_e}{dV^2} = V, \quad (70)$$

ahol f jelenti a keresett eloszlási függvényt.

A f eloszlási függvény $\left[\frac{2eV}{m_e}\right]^{\frac{1}{2}}$ helyen felvett értéke a (70) egyenlet alapján tehát az $i_e = f(V)$ görbéből kétszeres differenciálással megadható. A (70) egyenlet jobb oldalán szereplő első tényező értéke önmagában számítható, ismert adatokból tevődik össze, így kiszámítható tehát az eloszlási függvény. Az itt megadott módszer egyaránt alkalmazható sík, gömb és hengeres szondák esetében. A módszer gyenge pontja a kétszeri grafikus differenciálás, amely nem a legpontosabb adatokat nyújtja, még a legnagyobb elővigyázatosság mellett sem.

Mindenesetre ilyen módon közelítőleg jellemezhető az eloszlási függvény abban az esetben is, ha az esetleg több maximummal rendelkezik az elektronáram felfutási szakaszában. Ezen módszer az említett nehézsége, pontatlansága, miatt nem vált általánosan be, helyette *K. G. Emeleus* adott meg egy másik szellemes eloszlási függvény meghatározási módszert, amit *R. H. Sloane* és *E. I. R. MacGregor* fejlesztett ki [14].

Abból indultak ki, hogy az elektronáramfelfutási szakaszban a szondakarakterisztika általános esetben is, bármely számításba jövő eloszlásnál folytonos, nincsenek diszkontinuitásai, alakja a következő összefüggéssel jellemezhető [14]:

$$i = a_1 + a_2 V + a_3 V^2 + a_4 V^3 + a_5 V^4 + \dots \quad (71)$$

Ha ilyen előállítás igaz, s lehetséges, akkor mint azt Landale megmutatta [14], egy igen kis amplitúdójú váltófeszültség szondafeszültségre való szuperpozíciójával igen előnyösen használható összefüggéshez lehet jutni, ha az ezesetben adódó szondaáramokat Taylor sorba fejtjük.

A szuperpozícióhoz használt kis amplitúdójú váltófeszültséget $E = A \cdot \sin bt$ alakban felvéve, s sorbafejtve az $i = f(V + E)$ kifejezést, adódik

$$\begin{aligned} i = f(V) + A^2 f''(V) + A^4 f''''(V) + \left[A \cdot f'(V) + \frac{A^3}{8} f'''(V) + \dots \right] \sin bt \\ - \left[\frac{A^2}{4} \cdot f''(V) + \frac{A^4}{48} \cdot f''''(V) + \dots \right] \cos bt - \\ - \left[\frac{A^3}{24} f'''(V) + \dots \right] \sin 3bt + \\ + \left[\frac{A^4}{192} \cdot f''''(V) + \dots \right] \cos 4bt. \end{aligned}$$

Az itt feltüntetett f', f'', f''', f'''' az f eloszlási függvény első, 2., 3., 4. deriváltjai a V helyen. A kis amplitúdójú váltófeszültség szuperpozíciójával a sorfejtésnél egy új egyenáramú tag adódott. Figyelembe véve, hogy a szuperponált váltófeszültség A amplitúdója igen kicsi, annak magasabb hatványai, így már a negyedik hatványa is elhanyagolhatóan kicsivé teszi a deriváltakat. Emiatt az a szondaáram növekedés, amit a váltakozó áramú szuperpozíció váltott ki, jó közelítésben egyenesen arányos az eloszlási függvény második deriváltjával. A szóban forgó mérhető nagyságú áramnövekedést Δi -vel jelölve adódik

$$\Delta i = \frac{A^2}{4} \cdot f''(V), \quad (73)$$

ami direkt módon mérhető.

E módszer alkalmazását is kritikával kell fogadni [1]. Ugyanis a szondára adott váltófeszültségű jel a tapasztalat szerint bizonyos fokig megmásítja a szonda körüli tér eredeti helyzetét, zavart kelt a kisülési térben. Emiatt nem választhatók szét pontosan a zavartalan eredeti kisülés és a perturbált kisülés eloszlási függvényei. A jelen tanulmány szerzőjének véleménye szerint, amennyiben a mérésnél alkalmazott váltófeszültség frekvenciája a vizsgált kisülés saját frekvenciáitól elég távol van, valamint az alkalmazott váltófeszültség amplitúdója eléggé kicsiny, úgy ezen meghatározási mód jó eredménnyel alkalmazható. A kisülési tér jellemző saját frekvenciáinak ellenőrzésénél nemcsak az elektron- és ion-plazmafrekvenciára kell gondolni, hanem az álló és mozgó rétegződések karakterisztikus frekvenciatartományára is.

Mint az eddigiekből látható, a Langmuir-féle szondakarakterisztika egy szakasza alkalmas arra, hogy annak diszkutálásával az elektronok sebességeloszlási függvényére lehessen következtetni több-kevesebb pontossággal. Kielégítő pontossággal azonban az egyes speciális eloszlásokat még ma sem lehet meghatározni. Szerencsére a fizikai és technikai szempontból érdeklődésre számotartó kisülési típusok túlnyomó részénél az elektronok sebességeloszlása, vagy a Maxwell—Boltzmann, vagy pedig a Druyvesteyn eloszlásnak felel meg [1].

A Maxwell—Boltzmann eloszlás levezetésénél adódott, hogy a töltéshordozók között igen erős energia- és impulzuscsatolás áll fenn. Az eloszlás szempontjából az teljesen mindegy, hogy ez a csatolás milyen természetű. Amennyiben e csatolás fennáll, a külső zavarok nem mutatkoznak olyan könnyen a plazmában. Előfordulhat azonban, hogy e csatolás, pl. belső kisülési okok miatt nem tud kialakulni (tér-töltési, rétegződési, rezgési jelenségek stb.) ekkor az elektronáram felfutási szakasz deformációjából ez azonnal kimutatható. E deformációkat tekintve három különböző jellegű karakterisztika-torzulást szokás számontartani:

1. a kettős könyökű karakterisztikát, két jól definiált törésponttal az elektronáram szakaszánál,

2. a feszültségtengely felé konvex görbületű elektronfelfutási szakasszal rendelkező karakterisztikát,

3. a feszültségtengely felé konkáv görbületű elektronfelfutási szakaszú karakterisztikát.

Hogy ezek a karakterisztika-típusok milyen oknál fogva alakultak ki, azt pontosan nem lehet megadni, mindenesetre az megállapítható volt, hogy az elektronok sebességeloszlása ez esetekben eltér a Maxwell—Boltzmann eloszlástól, valamint, hogy olyan eloszlás-formák alakultak itt ki, amelyek legalább két különböző

energiaspektrum Maxwell—Boltzmann eloszlásra bonthatók fel, esetenként jól szétválasztható primér és szekunder jellegű elektron-csoporttal [15]. Ekkor azt szokás tenni, hogy a karakterisztika szakaszoknak megfelelően két, vagy több elektronhőmérséklettel számolnak [15], s megkülönböztetésül ezeket alsó, ill. felső elektronhőmérsékleteknek nevezik. Általában a magasabb elektronhőmérsékletek közelítik meg jobban a valóságot, de mindenesetre figyelembe kell venni az ennél alacsonyabb elektronhőmérsékletek jelenlétét is [15].

A szondamérési eljárás értékeléséhez R. L. F. Boyd is megadott egy analízist [1], amely a pozitív tértöltéssel körülvett szonda esetén kimutatható tértöltési zavarokra vonatkozik. A speciális módon végzett szondamérései nem jártak a várt kísérleti eredménnyel. Mindenesetre az alkalmazott elméleti leírás elvileg helyes és több megfontolandó momentumot tartalmaz, amelyek mint finomságot a pontos szondaméréseknél célszerű figyelembe venni. [1]

Mindenesetre, mint látható, a kisülési paraméterek Maxwell—Boltzmann energiaeloszlás esetén bizonyos kikötések teljesülése mellett jól meghatározhatók a szondamérések segítségével. A kisülési paraméterek egy része néhány speciális eloszlás esetén is számolható, sőt egyes esetekben közelítőleg magát az eloszlási függvényt is meg lehet határozni. A kisülési tér potenciálját mindaddig elég nagy pontossággal meg lehet adni, amíg egy határozott töréspontú szondakarakterisztika adódik. Más esetekben kiegészítő módszer és megfelelő további megfontolások alapján lehet esetleg a szondakarakterisztika értékelését elvégezni.

Kétszondás szondamérések

Igen gyakran kell meghatározni a kisülési jellemzőket olyan esetekben, amikor a kisülésben nincsenek elektródák. Ilyenkor a kisülési csőbe egymáshoz elég közel két szondát vezetnek be, ezáltal egy önálló mérési és hivatkozási rendszert alakítanak ki. A vizsgálatok elvégezhetősége érdekében alapvető kikötéseknek kell teljesülni, és pedig:

a) a töltéshordozók energiaeloszlása feleljen meg a Maxwell—Boltzmann eloszlásnak,

b) az elektronáram, fékezőterű szonda esetén a Maxwell—Boltzmann exponenciális törvénnyel leírható.

c) a két szonda felülete alak és anyagi minőség szempontjából jó közelítéssel megegyezzen,

d) a szondák között ne legyen kontaktpotenciálkülönbség,

e) a szondák közötti potenciálkülönbségtől ne függjön az ionáram telítési szakaszán annak nagysága,

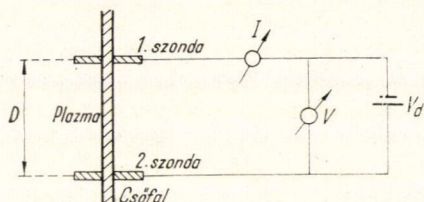
f) a szondák olyan közel nyúljanak be egymás mellett a kisülési térbe, hogy közöttük ne legyen számottevő potenciálkülönbség,

g) a szondák ugyanakkor ne legyenek annyira közel egymáshoz, hogy a körülöttük kialakuló tértöltési tartományok jelenségeit befolyásolhassák.

E kétszondás vizsgálati módszer E. O. Johnstontól és L. Maltertől ered [16]. Az már régebben kiderült, hogy a szonda által az azt körülvevő kisülési térben keltett zavar meghatározása nagyon komplikált feladat. Ez különösen igaz összeeső plazmák, lecsengő kisülések esetén. Ekkor a szondamérés teljesen megváltoztatja a kisülési teret, de az így előidézett zavar nagysága ez esetben sem adható meg.

A Johnson és Malter által [16] javasolt kétszondás szondamérési eljárásnál a plazmában kisebb zavar támad, mint az egyszondás méréseknél. Ennek megfelelően ez az eljárás a különböző kisülési paraméterek meghatározásánál nagyobb pontosságú eredményre vezet, mint az egyszondás módszer [16].

Egyes esetekben a kisülési cső fala vezetőanyagú. Az itt elvégzett egyszondás mérések, amelyeknél referencia-elektrodként a fal szerepel, lényegében a kétszondás mérési eljárás egyik változataként foghatók fel.



6. ábra. A kettős szondával való mérésnél alkalmazott elektromos kapcsolási elrendezés

A kétszondás méréseknél folyó szonda-áram általában kisebb, mint az egyszondás esetben folyó áram, s így a plazma megcsapolása kisebb lévén, kisebb az okozott zavar is.

A 6. ábrán látható a kétszondás mérésnél alkalmazott elektromos kapcsolási elrendezés; a szondakörben folyó áramot az I műszer, a szondák közti potenciálkülönbséget a V műszer mutatja, a szondák közötti

potenciálkülönbség nagyságát a V_d változtatható egyenfeszültségű stabilizált áramforrás segítségével lehet biztosítani.

A szondák távolsága, D úgy van megválasztva, hogy a fenti kikötések teljesüljenek.

Általában az elektronhőmérsékletek sokkal nagyobbak, mint az ionhőmérsékletek, s emiatt az előzőekben ismertetetteknek megfelelően a kisülésbe helyezett szonda negatív potenciálra töltődik fel a kisüléshez képest. A fali potenciállal bíró, kisülési térhez képest negatív szondára jutó elektron és ionáram összege nulla. Ezen áramok abszolút értékét, nagyságát a szondák felülete befolyásolja, a falipotenenciál nagysága azonban a szonda geometriai méreteitől az előzőek értelmében független. Ennek megfelelően ha két vezető darab egymáshoz közel merül, izotróp plazmába, úgy azok potenciálja jó közelítéssel megegyezik. Ezeket vezetővel összekötve, ennek megfelelően közöttük áram nem folyik. Ez a rendszer egy egyenfeszültségű áramforrással és a 6. ábrán feltüntetett mérőműszerekkel kiegészítve a kettős szondamérés elektromos körét alkotja.

Ha a 6. ábra szerinti V_d változtatható feszültségű telepről különböző potenciálkülönbségeket hozunk létre a szondák között, úgy azok ennek megfelelően a kisülési térből ion-, vagy elektronáramot fognak felvenni a kisülési térhez képest vett potenciáljuk szerint. Kiinduló potenciálértékként — mint referencia-potenenciál — a közös fali potenciál szerepel, ekkor a $V_d = 0$, a szondákat összekötő külső elektromos körben nem folyik áram, felírható a következő összefüggés:

$$\bar{i} = \bar{i}_{i2} - \bar{i}_{e2} = \bar{i}_{e1} - \bar{i}_{i1} = 0, \quad (74)$$

amely a fali potenciállal bíró szonda előzőek szerinti értelmezéséből következik. Itt

\bar{i}_{i2} jelenti a fali potenciálon levő 2. jelű szondán folyó ionáramot.

\bar{i}_{e2} a fali potenciálon levő 2. szondán folyó elektronáram.

\bar{i}_{e1} a fali potenciálon levő 1. szondán folyó elektronáram.

\bar{i}_{i1} a fali potenciálon levő 1. szondán folyó ionáram.

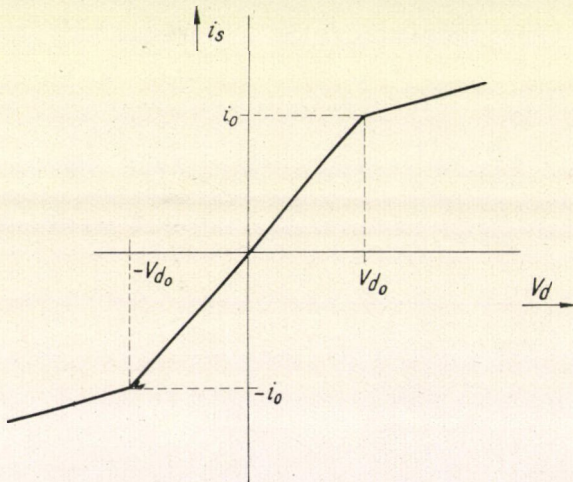
Ez esetben tehát az eredő áram nulla. Ha az 1. és a 2. szonda között V_d potenciálkülönbséget hozunk létre, így a külső kör szondafeszültségének változtatása révén megváltoztatjuk a szondákon folyó áramok nagyságát. A szondákat összekötő külső körben olyan i áram fog folyni, amelyre fennáll

$$i = i_{i_2} - i_{e_2} = i_{e_1} - i_{i_1}. \quad (75)$$

Ha nő a szondák közötti V_d potenciálkülönbség, úgy a negatívabb szonda veszi fel az ionáramot, majd további V_d növekedés esetében egy bizonyos V_{d_0} értéktől fogva a telítési ionáramot is, s mivel e kettős szonda zárt rendszert alkot, a pozitívabb szonda ugyanakkor az elektronáramot veszi fel.

Ha a szondák geometriai méretei nem térnek el egymástól jelentősen, úgy izotróp plazma esetén, mivel az elektronhőmérséklet lényegesen nagyobb, mint az ionhőmérséklet, a rendszerben ez esetben a pozitívabb szonda feszültsége is még alacsonyabb, mint a plazmapotenciál. Ez az elektron- és iontelítési áram nagyságával értelmezhető [7].

Ezek alapján a kettős szondára jellemző szondafeszültség-szondaáramkarakterisztikának a $V_d = 0$ pontja az origóba fog esni, miután itt az $\bar{i} = 0$; az iontelítési áram egy bizonyos V_{d_0} potenciálkülönbségnél jelenik meg, s ezután az ionáram a potenciálkülönbség $3/2$ hatványával arányosan változik.



7. ábra. A kettős szondával való mérés során adódó jelleggörbe. V_{d_0} és i_0 a telítési szakasz induló feszültsége, ill. árama. A karakterisztika csak azonos felületű szondák esetén adódik ilyen szimmetrikusnak

A kettős szonda jellemző szondakarakteristikája a 7. ábrán látható abban az esetben, ha a két szondafelület egymással azonos nagyságú. Amennyiben ez nem áll fenn, a karakterisztika alakja módosul, adott V_{d_0} értékhez nem ugyanazon i_0 értékek tartoznak. Az ionáram telítési értéke az előzőeknek megfelelően az

$$i_0 = 0,4 \cdot e \cdot n_0 \left[\frac{2T_e}{m_i} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot S \quad (76)$$

összefüggés alapján számolható, ahol a jelölések az eddigiekben alkalmazottakkal egyeznek.

Igen érdekes az elektronáram felfutási szakasz, azaz a 7. ábrán $(0, i_0)$ áramok közé eső karakterisztika-szakasz. Az ezen áramokhoz tartozó feszültségkülönbségeknél szondákon lefolyó áram az elektronáramok és ionáramok összege, amelyre felírható a (75) összefüggés átrendezésével:

$$i_{i_1} + i_{i_2} = i_{e_1} + i_{e_2}. \quad (77)$$

Figyelembe véve azt, hogy mindkét szonda potenciálja alacsonyabb, mint az illető helyen vett plazmapotenciál, s ennek megfelelően az elektronokra nézve fékező jellegű tér alakul ki a szondák körül, adódik

$$i_{i_1} + i_{i_2} = A_1 \exp \left[-\frac{eV_1}{kT_e} \right] + A_2 \exp \left[\frac{eV_2}{kT_e} \right]. \quad (78)$$

Kifejezve a szondák V_1, V_2 potenciálját a V_d -vel

$$V_d = V_2 - V_1. \quad (79)$$

Ennek alapján a (78) összefüggés alakja

$$i_{i_1} + i_{i_2} = A_1 \exp \left[-\frac{eV_1}{kT_e} \right] + A_2 \exp \left[-\frac{e(V_1 + V_d)}{kT_e} \right] \quad (80)$$

$$i_{i_1} + i_{i_2} = A_1 \exp \left[-\frac{eV_1}{kT_e} \right] + A_2 \exp \left[-\frac{eV_1}{kT_e} \right] \exp \left[-\frac{eV_d}{kT_e} \right] \quad (81)$$

formában írható, kifejezve V_2 értékét a V_1 és V_d segítségével. Osztva a (81) egyenlet mindkét oldalát a nullától különböző i_{e_1} -el, azaz

$$i_{e_1} = A_1 \exp \left[-\frac{eV_1}{kT_e} \right] \quad (82)$$

kifejezéssel, adódik

$$\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i_{e_1}} - 1 = \frac{A_2}{A_1} \exp \left[-\frac{eV_d}{kT_e} \right] \quad (83)$$

véve mindkét oldal logaritmusát

$$\log \left[\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i_{e_1}} - 1 \right] = \log \frac{A_2}{A_1} - \frac{eV_d}{kT_e}, \quad (84)$$

ahonnan az elektronhőmérséklet értéke kifejezhető a (84) összefüggés V_d szerinti differenciálásával

$$T_e = -\frac{e}{k} \frac{1}{d \log \left[\left(\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i_{e_1}} \right) - 1 \right]} \cdot \quad (85)$$

Ha figyelembe vesszük azt a kísérletileg is alátámasztott tényt, hogy a $(0, V_d)$ feszültségkülönbség intervallumban az ionáramok csak kevésbé változnak (7), úgy a (85) összefüggés alakja egyszerűbb formát ölt:

$$T_e = -\frac{e}{k} \frac{1}{\frac{d \log \left(\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i + i_i} - 1 \right)}{dV_d}} \quad (86)$$

s innen

$$T_e = -\frac{e}{k} \frac{1}{\frac{d \log \left(\frac{i_{i_2} - i}{i_{i_1} + 1} \right)}{dV_d}} \quad (87)$$

Az itt alkalmazott számolási mód látható módon sokban hasonlít az egyszondás mérések esetében alkalmazott értékelési eljáráshoz, amelyet a szondakarakterisztika ionáram szakaszával kapcsolatosan szokás végezni.

A T_e elektronhőmérséklet nagysága más úton is megadható (7), a

$$\left[\frac{di}{dV_d} \right]_{V_d=0} \quad (88)$$

kifejezésből kiindulva, meghatározva annak nagyságát. E célból (83) összefüggés a következő formába hozható:

$$i_{e_1} = \frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{1 + \frac{A_2}{A_1} \cdot \exp \left[-\frac{eV_d}{kT_e} \right]} \quad (89)$$

Képezve ennek a $V_d=0$ pontban a differenciálját a

$$\left[\frac{di_{e_1}}{dV_d} \right]_{V_d=0} = -\frac{e}{k} \frac{(i_{i_1} + i_{i_2}) \frac{A_2}{A_1}}{\left(1 + \frac{A_2}{A_1} \right)^2} \quad (90)$$

kifejezés adódik.

Kifejezve A_2/A_1 értékét a (83) egyenletből:

$$\frac{A_2}{A_1} = \left[\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i_{e_1}} - 1 \right]_{V_d=0} \quad (91)$$

Ezt behelyettesítve a (90) összefüggésbe a

$$\left[\frac{di_{e_1}}{dV_d} \right]_{V_d=0} = -\frac{e}{k} \frac{(i_{i_1} + i_{i_2}) \left(\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i_{e_1}} - 1 \right)}{\left(\frac{i_{i_1} + i_{i_2}}{i_{e_1}} \right)^2} \quad (92)$$

egyenlet adódik. Felhasználva a $V_d=0$ pontra vonatkozó szondák árama közötti (74) összefüggést, a (92) egyenlet a

$$\left[\frac{di_{e1}}{dV_d} \right]_{V_d=0} = - \frac{e}{kT_e} \left(\frac{i_{i1} \cdot i_{i2}}{i_{i1} + i_{i2}} \right)_{V_d=0} \quad (93)$$

egyszerűbb alakot ölti. Figyelembe véve továbbá, hogy

$$d_i = di_{e1} - di_{i1} \approx di_{e1} \quad (94)$$

a (93) összefüggés végső alakja, kifejezve abból a T_e elektronhőmérséklet nagyságát

$$T_e \approx - \frac{e}{k} \frac{1}{\left[\frac{di_{e1}}{dV_d} \right]_{V_d=0}} \left(\frac{i_{i1} \cdot i_{i2}}{i_{i1} + i_{i2}} \right)_{V_d=0} \quad (95)$$

Abban az esetben is elvégezhető a szondamérés, ha a plazma mágneses térben van, s kiértékelhető ez a karakterisztika szakasz. Azonban itt további paramétereket kell figyelembe venni, amelyek a számításokat lényegesen bonyolultabbakká teszi [7]. Ekkor ugyanis az elektronok mágneses térre merőlegesen történő diffúziós mozgása már jelentős szerepet játszik. Ezek értékelésére, s a szondamérések mágneses térben való elvégezhetőségére a továbbiakban kerül sor.

A kétszondás módszer lehetőséget nyújt a többi kisülési paraméterek meghatározására is. E módszer többek között potenciálvonatköztatási rendszerét tekintve előnyösen alkalmazható lecsengő plazmák vizsgálatánál, oszcilloszkopikus észlelés alkalmazásával.

Az itt bemutatott elektronhőmérséklet meghatározásánál az egyenletek értékelésére általában igen hosszú időt kell fordítani. Két gyorsabb módszert érdemes itt megemlíteni, amely az értékelési időt lerövidíti. Ezek közül az egyik az „equivalent resistance method” a másik pedig az „intercept method” [1]. Ezek részletes ismertetésére jelen dolgozat keretében nem kerül sor.

További egyszondás mérési módszer

Langmuir [2] lényegében három módszert próbált ki a kisülési terek paramétereinek meghatározásánál. Mindhárom esetben egy szondát vezetett be a vizsgálandó kisülési térbe, s az elsőnél az elektronfelfutási szakaszból, a másodiknál pedig az ionáram telítési szakaszából a fali potenciálig terjedő szondafeszültségeknél adódó áramszakaszból végezte az előzőekben vázolt módon a kiértékeléseket. A Langmuir által kikísérletezett harmadik szondamérési módszer az ún. izzószálas módszer [2]. Itt a kisülés vizsgálandó részébe egy hengeres, kis átmérőjű szondát vezetett be, s erre a kisülési térhez képest nem sokkal magasabb potenciált adott. A kisülési térből szondára folyó áramot a szonda hőmérsékletétől függetlennek találta [2]. Ennek oka abban rejlik, hogy a fűtött pozitív szonda felületéről a szondához képest alacsonyabb potenciálú kisülési térbe nem tudnak az elektronok kilépni. A kisülési térhez képest alacsonyabb potenciált adva a szondára, Langmuir azt tapasztalta [2], hogy a fellépő szondaáramot a szondából kilépő termikus elektronemisszió befolyásolja. Ennek megfelelően magasabb szondahőmérsékleteknél esetenként más és más szondaáram lép fel.

E megfigyelés alapján felvette [2] a szondaáram-szondafeszültség karakterisztikát két különböző szondahőmérséklet mellett. Az egyik hőmérsékletet úgy választotta meg, hogy azon a szondából csak igen kis termikus emissziós elektronáram lépjen ki, a másik esetben pedig a szondát olyan hőmérsékletre emelte, hogy ott a szondából kilépő termikus elektronáram a kisülési térből felvett elektron, vagy ionárammal összemérhető nagyságrendű legyen.

Fentiek alapján világos, hogy a vizsgált gáztér potenciálját ahhoz a ponthoz tartozó szondaáram adja, amelynél a két különböző hőmérsékleten felvett szondakarakterisztika egymástól elválik.

E módszer az előzőekhez képest nehezebb, csak a plazmapotenciál, vagy kisülési tér potenciáljának meghatározására használható, s ezért van az, hogy nem is terjedt el nagyobb mértékben. Előnye, hogy lehetővé teszi a vizsgált kisülési tér potenciáljának meghatározását abban az esetben is, ha a töltéshordozók energiaeloszlása nem követi a Maxwell—Boltzmann eloszlást. Mindenesetre e módszer további jó ellenőrzési lehetőséget rejt magában, a szondamérések plazmapotenciál meghatározásánál nyert eredmények diszkutálásához. Meg kell jegyezni azonban, hogy ezen eljárás mérési pontossága is kifogásolható, bár a tapasztalat szerint az ilyen jellegű mérések során adódó pontatlanság nagyságrendjét tekintve megegyezik az egyszondás szondaméréseknél adódó pontatlansággal. Az így adódó hiba jelentős részét a mérési berendezések hibája szabja meg, amit azok alkalmas megválasztásával jelentékenyen lehet csökkenteni.

Az „orbital motion” elmélet és gyakorlati alkalmazása

A Langmuir és Mott-Smith [2] által diszkutált szondakörüli mozgásjelenségek közül részletesebben érdemes foglalkozni az ún. „orbital motion” elmélettel. Ha a szonda potenciálja alacsonyabb, mint a kisülési téré, úgy az elektronok a szondát egy bizonyos valószínűséggel találhatják csak el — az előzőek értelmében — amennyiben kellő energiával rendelkeznek. Sok esetben az elektronok eljutnak ugyan a szondát körülvevő tértöltési tartományba, de a szondáig nem tudnak elérni, azt megkerülik, annak tere mozgás közben fékezőleg hat rájuk, s ekkor az ún. „orbital motion”-t végzik. Ebben az esetben az ismert (14) összefüggés

$$i = \frac{1}{4} \cdot n_e \cdot e \bar{v}_e \cdot S \cdot f \quad (96)$$

írja le a szondára jutó elektronáramot, az előzőekben alkalmazott jelölésekkel. Az f függvényre mint korrekciós függvényre azért van szükség, mert ennek segítségével lehet megadni a szonda effektív áramfelvevő felületét [2]. A szonda effektív áramfelvevő felülete nagyobb, mint a szonda fémes felülete (sík szondák esetén), de kisebb, mint a szondát körülvevő tértöltésréteg határfelülete. Ennek megfelelően a (96) egyenletben szereplő $S \cdot f$ felület nagyobb lesz, mint a szonda felülete, f [1]. Az f korrekciós függvény az előzőek szerint a töltéshordozók energiájának és a szonda, valamint a tértöltési tartomány geometriai jellemzőinek komplikált függvénye [2].

Két extrém esetet érdemes részletesebben elemezni az „orbital motion” elv figyelembevétele során (17). Az egyik eset akkor áll elő, ha a tértöltési réteg átmérője a szondaátmérőhöz képest kicsi, különösen a plazmapotenciálnál magasabb potenciállal bíró szondáknál. Ekkor a szonda áramfelvevő felülete (effektív felület) tart a tértöltési réteg felületéhez, s ennek megfelelően az f korrekciós faktor tart az r/a

értékhez, ahol r a szonda sugara, a pedig a tértöltési réteg sugara [2]. Ez az eset nagyfelületű szondáknál áll elő általában, amikor az elektromos tér a szondakörüli vékony tértöltéstartományra koncentrálódik, s ott ugyanakkor igen nagy elektronkoncentráció lép fel, mint az erős tértöltés következménye. Ebben az esetben a szondaáramot a tértöltési réteg felülete limitálja.

A másik említésre érdemes határeset akkor áll elő, ha a tértöltési réteg sugara nagy a szondasugarhoz képest. Ekkor az f korrekciós faktor a tértöltési tartomány sugarától függetlennek adódik. Ez főleg kis sugarú szondáknál tapasztalható, kis elektronkoncentrációjú plazmákban és olyan esetekben, amikor az

$$eV \cong kT_e \quad (97)$$

áll fenn. Ekkor az f korrekciós faktor alakja [2]

$$f = \frac{2}{\pi} \left[\frac{eV}{kT_e} - 1 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (98)$$

A szondaáramot az elektronok ezen „orbital motion”-jellegű mozgása szabja meg, s a (98) összefüggést alkalmazva a szondaáramokra nézve egyszerű összefüggést lehet találni a (96) egyenletből kiindulva:

$$i = \frac{1}{4} n_e \cdot e \cdot \bar{V}_e \cdot S \cdot \frac{2}{\pi^{\frac{1}{2}}} \cdot \left[\frac{eV}{kT_e} + 1 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (99)$$

Mindkét oldalt négyzetre emelve

$$i^2 = \frac{1}{4\pi} \cdot n_e^2 \cdot e^2 \cdot \bar{V}_e^2 \cdot S^2 \left[\frac{eV}{kT_e} + 1 \right] \quad (100)$$

alakú összefüggés adódik, ami azt jelenti, hogy ha az előzőekben említett feltételek teljesülnek, úgy a szondafeszültség és a szondaáram négyzete között egy lineáris összefüggés áll fenn, amelynek ábrázolása során adódó egyenes T meredeksége

$$T = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{kT_e} \cdot n_e^2 \cdot e^2 \cdot \bar{V}_e^2 \cdot S^2. \quad (101)$$

Ismét utalni kell arra, hogy az itt szereplő V potenciálkülönbség a szondának a környező kisülési térhez (plazmához) képest vett potenciálja, tehát a tértöltési tartományon való potenciálesés.

Az így nyert (100) összefüggés gyakorlati szempontból igen értékes. Ugyanis az így jellemzett egyenes a szondafeszültség tengelyt az $i=0$ -ban fogja metszeni. Ez láthatóan ott következik be, ahol a szonda a plazmához képest jóval negatívabb potenciálon van, nevezetesen

$$V = - \frac{kT_e}{e} \quad (102)$$

nagyságú szondafeszültség esetén. Ez teszi igen értékessé ezen elmélet diszkussziója során nyert második extrém esetet, ugyanis az itt bemutatott számolás segítségével kvantitativ meg lehet adni a plazmajellemzőket, anélkül, hogy ismerni kellene a tér-

töltési réteg vastagságát, amelyet általában igen nehéz számolni. Természetesen e módszer sem ad mindig kielégítő pontosságú eredményeket, mert a kiindulási feltételek (17) nem mindig teljesülnek. Mindenesetre ez egy további figyelembe veendő, gyors paraméter meghatározási lehetőség, amely a szondamérési eljárások kialakulásával fejlődött ki.

A szondamérések kísérleti jellemzése

A Langmuir-féle szondamérési eljárás nagymértékű elterjedtségét minden bizonnyal az alkalmazásához szükséges egyszerű kísérleti apparátus is indokolja. Az előző tárgyalásnál már hivatkozott 1. ábrán látható az egyszerű elemekből álló szondakör. A mérés elméleti feltételei a fentiek során már szintén szóba kerültek. A továbbiakban e helyen néhány olyan kísérleti feltétel kerül csak bemutatásra, amelynek teljesülése szintén ellenőrzést kíván a mérések megkezdése előtt.

Feltétlenül szükséges itt is megemlíteni a szondafelület méreteinek helyes megválasztását. Ugyanis ha a szonda felülete az elektronok közepes szabad úthosszához képest nagy, úgy az már jelentékenyen zavarja a kisülést, megmáskítja a vizsgálandó folyamatokat. Ha viszont ennek elkerülése végett túl kicsi a szonda felülete, előfordulhat, hogy az emiatt kicsinek adódó szondaáramok pontos mérése nem lehetséges. Ha erősítő fokozat kerül beiktatásra, úgy az nagyon könnyen megmáskíthatja a szondaköri viszonyokat, valamint annak esetleges torzítása miatt alkalmazása az eddigiekben nem járt kielégítő eredménnyel. Marad tehát egy kompromisszumos megoldás, amelynek megfelelő beállításánál, azaz a szondafelület nagyságának meghatározásánál, másodsorban a mérési technika fejlettsége is szerepet játszik.

Nagyon fontos a szonda felületi tulajdonságainak mérések előtti ellenőrzése [17, 18, 19]. Különösen oxidkátódos kisüléseknél az oxidkátód bevonatából kicsapódó báriumatomok nagymértékben meg tudják változtatni a szonda kilépési munkáját. A felületen adszorbeált gáztérteg szintén megváltoztathatja a szonda kilépési munkáját.

Higanygőzkisüléseknél a szondafelületen kémiai reakciók is végbemehetnek, elsősorban amalgámképződés, amely hozzájárul a kilépési munka időbeli és helyi inhomogenitásához [20–26].

Már Dürrwang megállapította 1938-ban [20], hogy a szondakarakterisztika attól függ, hogy a mérés milyen körülmények között kerül lebonyolításra. Kimutatta [20], hogy a szondafelület kilépési munkája függ az időtől, s ezt a

$$\varphi_0 - \varphi_t \approx \exp \left[-\frac{t}{\tau} \right] \quad (103)$$

alakú összefüggéssel jellemezte, ahol

φ_0 a szonda $t=0$ időpontban mért kilépési munkája,

φ_t a szonda t időpontban mért kilépési munkája,

t az időváltozó,

τ karakterisztikus konstans, jellemző a mérési feltételekre.

A kilépési munka időfüggésének kiküszöbölésére Dürrwang egy váltakozó áramú eljárást adott meg [20], s ennek ellenőrzésére a szondakarakterisztikát oszcilloszkopikusan vizsgálta. Szokás felületi ellenállásváltozásra is visszavezetni a kilépési munka eltolódásának meghatározását [22–23], s így ellenőrizni a mérések megkezdése előtt a szondafelületet.

Higanygőz-kisülésekben a lerakódó amalgám (báriummal) zavarja a szondamérést. E zavar olyan mérvű lehet, hogy a felvett szondakarakterisztika még a mérés irányától is függhet [19]. Ez azzal magyarázható, hogy amikor a szonda a kisülési térrel azonos potenciálon van, vagy annál pozitívabb, az erős elektronbombázás elbontja az amalgámot, s letisztul a szonda felülete. Az ezután elvégzett mérések reális eredményt adnak.

Ezen megfigyelésből kiindulva szokás a szondafelületet elektronbombázással megtisztítani a mérések megkezdése előtt. Ez az egyik legjobban bevált kísérleti módszer, amely jól reprodukálható reális mérési eredményeket adott.

Esetenként szokás a szondát izzítani, s ily módon elvégezni a felület-tisztítást. Ennek az a hátránya, hogy így a szondakörüli tér hőmérséklete is megemelkedik, s ennek megfelelően a gázhőmérséklet is eltolódhat az eredeti egyensúlyi értéktől [19]. A nagyfrekvenciás úton történő szondafelület-tisztítás is ezzel a hátránnyal jár [18].

Shokás még végül a szondafelületet oly módon tisztítani, hogy a szondára a környező kisülési térhez képest nagy negatív feszültséget adnak, s ezzel beállítják a szondakarakterisztika ionáram-telítési szakaszát. A becsapódó ionok bombázása révén bizonyos fokig tisztul a szonda. E módszer hátránya, hogy csak nemesgáz kisüléseknél és olyan esetekben alkalmazható, amikor a kisülés gáza, vagy gőze nem hozhat létre az így megemelkedett hőfokon további szennyezéseket, reakciókat a szonda felületén [27–28].

Alapvető fontosságú az *Emeleus* [9] által felismert — az előzőek során már utalt — tény szemelőtt tartása: nikkal szonda higanygőzben nem emittál elektront, minden más anyagú szonda, bármely más gázzal általában elektront emittál abban az esetben, ha a környező kisülési térhez képest eléggé alacsony potenciálon van.

Ezen itt ismertetett néhány preventív intézkedés betartása alapvető fontosságú a szondamérések eredményeinek stabilitása végett. A szonda felületi sajátosságai jelentősen befolyásolják a méréseket [17], s ugyanakkor nagymértékben függ a mérés pontossága a szondakörben alkalmazott műszerek pontosságától és berendezések stabilitásától (feszültségforrás), valamint a kisülési egyensúly állapotának biztosításától. Általában azonban azt lehet mondani, hogy a legtöbb kísérleti óvintézkedést a vizsgált kisülés jellege és a kívánt mérési pontosság szabja meg.

A szondamérések főbb hibaforrásai, korlátai

Az előzőek során néhány kikötésből kiindulva röviden bemutatásra kerültek a fontosabb egyenáramú szondamérési eljárások, s azok elméleti alapjai. Az itt megadott feltételek azonban nem mindig teljesülnek maradéktalanul. Vegyük sorba tehát azokat a momentumokat, amelyek a szondamérések fontosabb hibaforrásait képezik, s amelyek kiküszöbölése az előzőek során a kezdeti feltételek kikötésével történt.

Feltételezésre került, hogy a *szonda kisülési térben való jelenléte* nem befolyásolja azt és ennek megfelelően nem változik meg a plazmapotenciál, a töltések térbeli eloszlása, valamint a szondára jutó elektronok energiaeloszlása is megfelel a perturbálatlan szondakörüli kisülési térben levő energiaeloszlásnak.

Emiatt mint már az előzőekben erről szó volt, a szondát igen kicsire kellene választani, de sík szonda esetén ekkor nagyon megnőne a szondafelület határain

fellépő karakterisztika-torzító hatás, s ugyanakkor lecsökkenne a szondaáram nagysága, ami a mérés pontosságát zavarná. A viszonylagosan megnyugtató megoldás hengeres és gömbszondák alkalmazásával adódik, ahol természetesen figyelembe kell venni a korrekciós függvényeket is.

A szonda felületét elég kicsire választva a plazmában előidézett zavar is kicsi lesz. Ha a nagy negatív szondafeszültségekhez tartozó ionáram telítési szakaszt vesszük alapul a lehetőleg kisfelületűre választott szonda áramfelvételének vizsgálatánál (1), úgy $n_i = 10^8$ ion/cm³ és $S = 10^{-3}$ cm² szondafelület esetén az

$$i_i = \frac{1}{4} \cdot e \cdot n_i \cdot \bar{v}_i \cdot S$$

összefüggésből számolva, átlagos iontömegeket és ionhőmérsékletet feltételezve, az ionáram nagysága $5 \cdot 10^{-10}$ A-nek adódik. Ez az áram az általában használatos galvanométerek mérési határánál van. Ennek megfelelően a szondamérések általában olyan kisüléseknél realizálhatók, ahol az ionok koncentrációja legalább 10^8 ion/cm³. Ez arra az esetre vonatkozik, amikor a szondakarakterisztika ionáram szakaszából történik a kisülési paraméterek meghatározása.

Feltételezésre került továbbá, hogy a tértöltési réteg teljesen leárnýékolja a fémes szondát [1], és annak nem marad vissza kisülési tér felé zavaró hatása. Ez nem teljesen felel meg a valóságnak, ugyanis magát a tértöltési réteget is zavarja a bennelevő szonda. Különösen negatív szondák esetén lép fel zavar a tértöltési rétegben, amikor a nagyenergiájú elektronok behatolnak a szondakörül térbe, s ott mikroterükkal zavart idéznek elő mind a töltéshordozó áramban, mind pedig a töltéshordozók energiaeloszlásában. Különösen az elektronáram felfutási szakasz azon részén számottevő ez a zavartípus, ahol a szonda körül csak vékony tértöltési réteg van, s a szonda már közel olyan potenciálú, mint a környező plazma.

Erősen negatív szonda esetén a becsapódó elektronok és az „orbital motions”-t végző elektronok megváltoztatják a tértöltési tartomány koncentráció-viszonyait, a semleges atomokkal és molekulákkal ütközve energiájuk egy részét leadják, s ezzel megváltoztatják az eredeti energiaeloszlást. Ez különösen kis redukált térerősségek esetén számottevő, ahol még az ionizáció is jelentős valószínűséggel végbemehet a nagy gáznyomás miatt.

Feltételezésre került, hogy a töltéshordozók a szonda felé haladva ha már átlépik a tértöltés tartomány határait, úgy el is érik a szondafelületet és *áramként regisztrálódnak*. Ugyanakkor e feltevés másik oldala fenn kell hogy álljon, ami végeredményben az előzőekkel kapcsolatos: ha egy töltéshordozó a szondára jut, az csak a plazmából jövet juthat a szondára. Ezen feltevések nem mindig teljesülnek, különösen igen negatív szondák és nagy átmérőjű tértöltéstartományok esetén van baj, mert a tértöltési rétegbe belépő elektronok a semleges atomokkal általában ütköznek, s azokat ionizálják. Ennek kiküszöbölésére (a számítások során) Druyvesteyn adott meg korrekciós faktort [1], amely csak ott alkalmazható, ahol az ilyen elektronok által történő energiaátadási folyamatok fellépnek, de nem nagy számmal.

További probléma az elektronok és ionok szondafelületről való reflektálódása, annak kis akkomodációs koefficiense miatt; a metastabil atomok, elektronbefogás, nagyenergiájú fotonok révén adódó töltéshordozó generálás, valamint ezzel együtt a szondafelület elektronemissziójaként létrejött elektronáram, a szondafelületből felszabadított szekunder elektron és ionemisszió, a negatív ionok tértöltési tartomány-

ban való képződése, amely mind számottevően befolyásolja a szondaáramot. Ezek függenek a szonda potenciáljától és a gáznyomástól [1]. Magasabb gáznyomásnál, vagy gőznyomásnál létrehozott kisülésekben a szonda szekunder elektronemissziója kisebb, mint alacsonyabb nyomásoknál. Mindezen tényezők igen komoly hiba-lehetőségeket rejtnek magukban.

A felületi jellegű zavaró áramok kialakulását bizonyos fokig meg lehet gátolni a szondafelület megfelelő érzéketlen fémrel való bevonása esetén. Elsősorban a magnézium jön itt számításba [1], amely azonban esetenként további nehézségeket okoz a mérés realizálásának biztosításánál. A szonda felületének tisztántartása, valamint ezen nemkívánatos áramok kiküszöbölése az eddigiekben is igen sok problémát okozott, s az ebből eredő mérési pontatlanságok adták a szondamérésnél elkövetett hiba jelentős százalékát.

Feltételezésre került, hogy a szonda és a referencia-elektrod között nincs *kontaktpotenciál különbség*. Ez abban az esetben teljesül, ha a szonda és a referencia-elektrod anyaga megegyezik, valamint azonos módon van kitéve az ion-, ill. elektronbombázásnak, s a mérés ideje alatt kilépési munkájuk nem változik meg.

A szonda anyaga azonban gyakran nem egyezhet meg a referenciaelektrod anyagával, s ekkor már számolni kell a kontaktpotenciál különbség jelenlétével. Ez főleg a plazmapotenciál meghatározásoknál jelent komoly mérési pontatlanságot. Az eloszlási függvény és az elektronhőmérséklet számolásánál a számítási eljárás jellegénél fogva pontatlanság nem jelentkezik.

Komoly probléma a szonda felületének mérés közben való tulajdonság változtatása [17]. Az ezzel kapcsolatos kísérleti és elméleti vizsgálatok [29] megmutatták, hogy a szondafelület jelenségei igen bonyolultak, a kilépési munka és annak megváltozása erősen függ a szonda potenciáljától, a gáztér jellegétől és az ottlevő gázoktól, ill. gőzöktől. Mint az előzők során már erre történt utalás, a szondafelület kilépési munkájának változását az elővigyázatossági feltételek betartásával jelentősen le lehet csökkenteni. Erre a tapasztalat szerint az elektronbombázással, esetleg külső nagyfrekvenciás erőterrel való felületmegtisztítás a legalkalmasabb [18, 27, 28].

Feltételezésre került, hogy a kisülésben csak *egynemű negatív töltéshordozók* vannak. Ez azt jelenti, hogy a negatív töltéshordozók mozgékonyasága is jól meghatározható a lokális elektromos tér és a sebességeloszlás alapján. Amennyiben a kisülés elektronegatív gázban folyik le, úgy az eddigiekben elektronáramfelfutási szakasznak nevezett szakasz is és a fali potenciálértéke is megváltozik. Az ilyen esetekben adódó mérési adatok egyáltalán nem, vagy csak igen nagy nehézséggel interpretálhatók. Az elektronegatív gázoknál adódó másik nehézség a tértöltési, vagy másnéven Langmuir-féle rétegben való elektronokkal történő kölcsönhatás, ami lényegesen megváltoztathatja a szondakörüli viszonyokat. Ezek alapján a jelenleg ismert szondamérési módszerek nem alkalmasak elektronegatív gázok szondamérésekkel történő plazmadiagnózisához.

Feltételezésre került, hogy a vizsgált kisülés stacioner állapotban van, azt egyenfeszültségű áramforrás táplálja, valamint a szonda is izotróp kisülési zónába (plazmába) merül. Ez a feltétel a legritkábban teljesül. Ugyanis az irodalom szerint [30] alig találni olyan egyenfeszültségű áramforrásról táplált kisülést, amelynél valamilyen rezgési jelenség, instabilitás tartósan és karakterisztikusan ne állna fenn, annak stacionernek nevezett, egyensúlyi állapotában is. Itt nem cél ezen jellegzetes rezgési folyamatok ismertetése, ez az irodalomban részletesen megtalálható [30], mindenesetre érdemes megemlíteni a számításbajövő fontosabb rezgési típusokat:

elektron- és ionplazmarezgések, eloszlást moduláló nagyfrekvenciás rezgések, katód terek instabilitásai, az anódos ingadozásából eredő rezgések és az álló, vagy mozgó rétegződés karakterisztikus rezgései. Ezek a fontosabb, szondaméréseket zavaró főbb rezgési típusok, amelyek ún. egyensúlyi állapotban levő kisüléseknél fellépnek abban az esetben, amikor külső mágneses tér nincs. Ha csak azt vesszük figyelembe, hogy ezek mind kihatnak a tértöltési, vagy Langmuir-réteg folyamataira, s mint speciális „energiacsatolás” jelentkeznek a kisülési térben, már könnyen belátható az innen adódó hibalehetőség, ami elsősorban a töltéshordozók hőmérsékletének meghatározásánál és az eloszlási függvény felvételénél játszik közre. A kisülési tér potenciáljának meghatározásánál ezek nem játszanak számottevő szerepet.

E rezgések kiküszöbölése gyakorlatilag lehetetlen, ezekkel tehát számolni kell, s a szondamérések ez esetben adódó eredményeinek elfogadása csak azok más úton történő kontrollálása után történhet meg.

Mint az előzőekben tárgyalásra került, hengeres és gömbszondák alkalmazása célszerű, de ekkor korrekciós faktort is szükséges figyelembe venni. Feltételezésre került, hogy e korrekciós faktor reális eredményeket hoz. Ez a valóságban nem mindig van így [1]. Általában a korrekciós faktor nehezen adható meg, annak értéke nem mindig pontos. Ezért grafikus approximációval kell viszonylag hosszadalmas eljárás útján az idealizált viszonyok között nyert korrekciós faktort még pontosabbá tenni. Ez azonban szerencsére nem komoly hibalehetőség. Az ilyen módon adódó esetleges hiba eltérpül a szekunder elektronemisszióból és az oszcillációkból származó mérési pontatlanságokhoz képest.

Az egész mérés alapját képezte az a feltevés, hogy a töltéshordozók *energia-eloszlása a Maxwell—Boltzmann eloszlásnak felel meg*. Szerencsére az általában vizsgált kisülések jó részénél e feltevés helytálló. Alacsony elektronkoncentrációk esetén és olyan tereknél, ahol az ionizáló és gerjesztő ütközések ritkák, valamint ahol az elektronok közepes szabad úthossza erősen változik az energiával, a Maxwell—Boltzmann eloszlás nem áll fenn. Ha ettől eltérés adódik, az eloszlás az itt ismertetett módszerek valamelyikével meghatározható, s esetleg valamelyik görbe-szakasz alkalmas is egyes további paraméterek meghatározására.

A szondamérés magától értetődően nem alkalmazható akkor, ha a szonda potenciálja olyan, hogy a szondán lefolyó áram a kisülési árammal összemérhető nagyságú. Ez a kisülési viszonyok igen durva megváltoztatására vezetne, ami kizárólag az elektronáram telítési szakasza környékén adódhat csak elő. E karakterisztika-szakasz felvételére azonban általában nincs szükség, s így e hibalehetőség a legkritikább esetben jöhet csak szóba.

Az eredeti szondamérési kritikák és diszkussziók még azt tételezték fel, hogy a töltéshordozók a tértöltési tartományban mint nagyvákuumban szabadon mozognak [12], ma már az elméleti leírás finomításával [31] ez a feltevés szükségtelenné vált, csak a Langmuir-réteg kölcsönhatási jelenségeinek korlátozását kellett változtatlanul fenntartani.

Egyes gőzkisülésekben (pl. kálium, nátrium stb.) a szonda igen speciális módon is zavart okozhat [31], a kisülési tér lokális hűtése révén. Ezt úgy lehet elhanyagolhatóvá tenni, hogy a szonda méreteit igen kicsinyre választják, s esetleg magát a szondát fűtik is.

Meg kell jegyezni, hogy a szonda hőmérsékletének változtatása általában megváltoztatja a mérendő folyamatokat. Többek között befolyásolhatja a szonda

akkomodációs koefficiensét is, ami az előzőekben említett töltéshordozó reflektálódás mértékét szabja meg [32—33].

Látható, hogy a szondamérés elvégezhetősége és interpretálhatósága számos előfeltétel betartását és teljesülését kívánja meg. Ugyanakkor a szondamérés forró plazmák esetén már egyenáramú kisülési feltételnél sem alkalmazható. Mint a továbbiakban tárgyalásra kerül, a külső mágneses tér jelenléte is megnehezíti a mérés elvégzését, esetenként pedig lehetetlenné is teszi azt. Alapvető kikötés a szonda méreteinek a közepes szabad úthosszak figyelembevételével való megválasztása. Ha r_s jelöli a szonda sugarát, L a töltéshordozók közepes szabad úthossza közül a kisebbet, fenn kell állni a

$$r_s \ll L \quad (104)$$

egyenlőtlenségnek. Ebből kiindulva *Bohm* [8] adott meg egy összefüggést a szonda-áramban emiatt fellépő eltolódásokra, valamint *Boyd* [34] analizálta a [104] feltétel nemteljesülése miatt fellépő árameltolódásokat és azok okát.

A szondamérés [34—106] segítségével egyenáramú esetben jól megadható tehát a főbb mérési kikötések teljesülése esetén a plazmapotenciál, a falipotenciál értéke, valamint a töltéshordozók energiaeloszlása. A szondakarakterisztikából számolható elektronhőmérsékletek ezekben jól megfelelnek a reális viszonyoknak, a koncentrációk pedig mintegy ötös faktor erejéig elfogadhatók. A faliáramok, ambipoláris diffúziós jellemzők viszonylag pontosan megadhatók. Az elektronkoncentráció számításánál a reális értékektől való eltérésre már a karakterisztika alakjából is lehet következtetni.

IRODALOM

- [1] *L. B. Loeb*: Fundamental Processes of Electrical Discharges in Gases. John. Wiley and Sons. 1939.
- L. B. Loeb*: Basic Processes of Gaseous Electronics. University of California Press. 1961.
- [2] *I. Langmuir, H. M. Mott-Smith*: Gen. El. Rev. 26, 731, 1923; 27, 449, 583, 616, 726, 810, 1929.
- I. Langmuir, H. M. Mott-Smith*, Science 58, 290, 1923.
- I. Langmuir, H. M. Mott-Smith, J. Frankl.*: Inst. 196, 751. 1923.
- I. Langmuir, H. M. Mott-Smith*: Phys. Rev. 28, 738, 1926.
- I. Langmuir*: Zeitschrift der Physik 46, 271, 1927.
- I. Langmuir*: Phys. Rev. 31, 357, 1928.
- I. Langmuir*: Phys. Rev. 33, 954, 1929.
- I. Langmuir, K. T. Compton*: Rev. Mod. Phys. 3, 191, 1931.
- [3] *K. K. Darrow*: Electrical Phenomena in Gases. W. Wilkins, Baltimore 1932.
- [4] *J. Townsend, J. Frankl.*: Inst., 200, 565, 1925.
- [5] *S. Kojima, K. Takayama*, Phys. Rev. 80, 907, 1950.
- M. A. Easley, W. W. Mumford*: J. Appl. Phys. 22, 846, 1951.
- [6] *L. S. Ornstein, H. Brinkman, T. Hamada*: Proc. Acad. Amst. 39, 315, 1936.
- [7] *V. D. Rusanov*: Szavremenije metodü isledovanyija plazmü. Goszatomizdaty. 1962. Moszkva.
- [8] *D. Bohm*: The Characteristics of Electrical Discharges in Magnetic Fields. Guthrie and Wakerling N. Y. 1949.
- [9] *K. G. Emeleus*: The Conduction of Electricity through Gases. Methuens. London, 1951.
- [10] *W. Uytendhoeven*: Elektrische Gasentladungslampen. Springer, Berlin, 1938.
- [11] *J. D. Cobine*: Gaseous Conductors. Dover Publication Inc. New York, 1958.
- [12] *A. Engel, M. Steenbeck*: Elektrische Gasentladungen, Ihre Physik und Technik II, Springer, 1934.
- [13] *M. J. Druyvesteyn*: Z. Physik, 64, 790, 1930.

- [14] R. H. Sloane, E. I. R. MacGregor: *Phil. Mag.* 18, 193, 1934.
- [15] M. J. Schönhuber: Quecksilber-Niederdruckentladungen. Hochschulbuchhandlung Lachner. München 1958.
- [16] E. O. Johnson, L. Malter: *Phys. Rev.* 76, 1411, 1949.
E. O. Johnson, L. Malter: *Phys. Rev.* 80, 58, 1950.
- [17] W. Verweij: Probe measurements and determination of electron mobility in the positive column of low-pressure Mercury-argon discharges. Thesis. 1960. Utrecht.
- [18] Bitó J.: Egyen- és váltóáramú gázkisülések vizsgálata szondamérések segítségével. Doktori disszertáció. 1960. Szeged.
- [19] S. Flügge: *Handbuch der Physik. XXII.* Springer Verlag. Berlin. 1956.
- [20] J. Dürwang: *Helv. phys. acta.* 8, 333, 1935.
- [21] W. P. J. van Berkel, *Physica*, Haag, 5, 230, 1938.
- [22] E. S. Lamar, K. T. Compton: *Phys. Rev.* 9, 1069, 1931.
- [23] A. L. Reimann, *Phil. Mag.* 20, 594, 1935.
- [24] M. A. Easley: *J. Appl. Phys.* 22, 590, 1951.
- [25] T. A. Anderson: *Phil. Mag.* 38, 179, 1947.
- [26] G. Wehner, G. Medicus: *J. Appl. Phys.* 23, 1035, 1952.
- [27] Bitó J., Szemző I.: *Magyar Fizikai Folyóirat.* 12, 121, 1964.
- [28] Bitó J.: *Magyar Fizikai Folyóirat.* 12, 111, 1964.
- [29] C. W. Oatley: *Proc. Phys. Soc. A51*, 318, 1939.
G. L. Weissler et al.: *Phys. Rev.* 73, 538, 1948.
G. L. Weissler et al.: *Phys. Rev.* 76, 591, 1949.
G. L. Weissler et al.: *J. Appl. Phys.* 24, 472, 1953.
T. A. Anderson, *Phil. Mag.* 38, 179, 1947.
G. Wehner et al.: *J. Appl. Phys.* 23, 1035, 1952.
G. Wehner et al.: *Phys. Rev.* 93, 647, 1954.
G. Wehner et al.: *J. Appl. Phys.* 25, 270, 1954.
M. A. Easley: *J. Appl. Phys.* 22, 590, 1951.
- [30] Bitó J.: *Magyar Fizikai Folyóirat.* 10, 303, 1962.
- [31] W. L. Granowski: *Der Elektrische Strom im Gas. I., II.* Akademie Verlag Berlin, 1955.
- [32] G. Mierdel, *ATM*, 25 März. 1940.
- [33] F. Wenzl: *Z. Angew. Physik* 2, 59, 1950.
- [34] R. L. F. Boyd: *Proc. Roy. Soc.* 64, 195, 1951.
- [35] D. Gabor: *Phys. Z.* 34, 38, 1933.
- [36] D. Gabor: *Z. techn. Phys.* 13, 560, 1932.
- [37] W. E. K. Middleton et al.: *Canad. J. Res.* 4, 498, 1931.
- [38] T. J. Killian: *Phys. Rev.* 35, 1238, 1930.
- [39] B. Klarfeld: *Zs. T. F.* 5, 913, 1938.
- [40] R. M. Howe: *J. Appl. Phys.* 24, 881, 1953.
- [41] W. Pupp: *Z. Techn. Phys.* 15, 257, 1934.
- [42] K. Rademacher et al.: *Ann. Phys.* 2, 57, 1958.
- [43] C. Kenty et al.: *J. Appl. Phys.* 22, 1006, 1951.
- [44] M. Pahl et al.: *Z. Naturforschung* 13a, 745, 1958.
- [45] W. Schottky: *Phys. Z.* 25, 635, 1924.
- [46] W. O. Schumann: *Naturwiss.* 31, 115, 1943.
- [47] H. Fetz et al.: *Z. angew. Phys.* 2, 150, 1950.
- [48] P. K. Hermann: *Z. techn. Phys.* 17, 482, 1936.
- [49] R. Seeliger, et al.: *Ann. Phys.* 11, 817, 1931.
- [50] K. G. Emeleus et al.: *Phil. Mag.* 14, 355, 1932.
- [51] D. Gabor: *Z. Phys.* 84, 474, 1933.
- [52] R. J. Bickerton: *D. Phil. Thesis.* Oxford. 1954.
- [53] R. J. Bickerton et al.: *Proc. Phys. Soc. B* 69, 468, 1956.
- [54] E. Nölle: *Ann. Phys.* 6, 18, 328, 1956.
- [55] M. A. Biondi et al.: *Phys. Rev.* 75, 1700, 1949.
- [56] T. Okuda et al.: *J. Phys. Soc. Jap.* 11, 177, 1956.
- [57] G. Hofmann: *Z. Naturforsch.* 18a, 309, 1963.
- [58] Y. Ichikawa et al.: *Progr. theor. Phys.* 315, 1962.
- [59] S. Kojima et al.: *J. Phys. Soc. Jap.* 4, 349, 1949.
- [60] S. Kojima et al.: *J. Phys. Soc. Jap.* 5, 357, 1950.
- [61] G. J. Schultz et al.: *Phys. Rev.* 98, 1642, 1955.

- [62] R. L. F. Boyd: Proc. Roy. Soc. A201, 329, 1950.
- [63] S. Aisenberg: Ph. D. thesis. 1957.
- [64] S. Aisenberg: Lecture at 3. Symposium on Engineering Aspects of Magnetohydrodynamics, 1962. márc. 28—29.
- [65] K. Yamamoto et al.: J. Phys. Soc. Japan 11, 57, 1956.
- [66] S. Aisenberg: Lecture at 23rd Annual Conf. Phys. Electronics MIT 1963.
- [67] S. Aisenberg: Appl. Phys. Letters, 2, 187, 1963.
- [68] S. Aisenberg: J. Appl. Phys. 35, 130, 1964.
- [69] M. A. Biondi et al.: Phys. Rev. 75, 11, 1700, 1949.
- [70] J. Wilhelm: Ann. Phys. 6, 12, 7—8, 401, 1953.
- [71] J. Wilhelm, Wiss. Z. E. M. Arndt: Univ. Greifswald 4, 603, 1954.
- [72] E. Nölle: Technisch-wissenschaftliche Abhandlungen der Osram-Gesellschaft, 7, 65, 1958.
- [73] E. C. Beaty: Phys. Rev. 104, 17, 1956.
- [74] J. Wilhelm: Probleme des Plasmas in Physik und Astronomie. 110, 1958.
- [75] J. E. Allen: Előadás az olasz nemzetközi nyári iskolán. 1959. Varenna.
- [76] W. Verweij: Physica. 25, 10, 980, 1959.
- [77] I. B. Bernstein et al.: Phys. Fluids 2, 112, 1959.
- [78] L. Talbot: Phys. Fluids 3, 289, 1960.
- [79] H. Fetz et al.: Z. Angew. Phys. 12, 250, 1960.
- [80] A. L. Efrosz: Zs. T. F. 30, 1024, 1960.
- [81] H. W. Jones et al.: J. Sci. Instr. 37, 457, 1960.
- [82] E. Hayess: Exp. Techn. Phys. 8, 145, 1960.
- [83] A. I. Anisimov et al.: Zs. T. F. 30, 1009, 1960.
- [84] J. E. White: J. Appl. Phys. 31, 1502, 1960.
- [85] M. Hoyaux: ACEC Technikai Közlemények. 1954. NR/ER/MH/PG/ 590427.
- [86] T. Ichimiya et al.: Space Research, 397, 1960.
- [87] H. W. Jones et al.: AERE-R 3611 Közlemény. 1961. Harwell.
- [88] E. Hayess et al.: Ann. Phys. 7, 8, 158, 1961.
- [89] G. Medicus: Proc. 5th Int. Conf. on Ion. Phen. in Gases. Munich 1961.
- [90] G. Ecker et al.: Proc. 5th Int. Conf. on Ion. Phen. in Gases. Munich 1961.
- [91] T. Dote et al.: J. Phys. Soc. Japan. 17, 1, 174, 1962.
- [92] G. Schulz: Z. Phys. 170, 196, 1962.
- [93] T. B. Read: British J. Appl. Phys. 14, 36, 1963.
- [94] K. M. Burrows: Australian Journal of Physics, 15, 162, 1962.
- [95] W. Ott: Z. Naturforschung 17a, 962, 1962.
- [96] T. Dote et al.: Proc. of the IEEE, 51, 3, 1963.
- [97] T. Dote et al.: J. Phys. Soc. Japan 18, 2, 260, 1963.
- [98] J. H. Ichikawa: Egyetemi Közlemények. NUP 63—12. 1963.
- [99] H. Wagner et al.: Z. angew. Phys. 16, 230, 1963.
- [100] F. W. Crawford: J. Appl. Phys. 34, 1897, 1963.
- [101] R. S. Harp: Rev. Sci. Instr. 34, 416, 1963.
- [102] A. R. Galbraith et al. Physica 29, 1165, 1963.
- [103] J. E. Allen, A. Turrin: Proc. Phys. Soc. 83, 177, 1964.
- [104] N. I. Ionov: Zs. T. F., 34, 5, 769, 1964.
- [105] A. R. Galbraith et al.: Physica 29, 1313, 1963.
- [106] G. Hofmann: Elektrische Sondenmessungen in schnellen stromstarken Stossentladungen. IPP 118. Dec. 1962.

A FÖLD BELSŐ SZERKEZETÉRŐL. III.*

HÉDERVÁRI PÉTER

Gamma, Geofizika, Budapest

A dolgozat első részében [1] a zérus- és monodiszkontinuitású Föld-modellekkel, valamint a geokémiai modellekkel foglalkoztunk. A második részben [2] került sor a geofizikai modellek tárgyalására. A jelenlegi, harmadik részben az 1896. január 1.—1963. december 31. között a Föld valamennyi szeizmikus területegységén kipattant 6,9 magnitúdójú és annál nagyobb méretű földrengés mélység-felszabadult energia összefüggése alapján [3] néhány következtetést vonunk le a felső köpeny szerkezetére vonatkozóan, egyúttal pedig érintjük a Föld belső hőmérsékleteloszlásának kérdését is.

Bevezetés

A Föld belső szerkezetével kapcsolatos eddigi vizsgálatok [1, 2] során a zérus- és monodiszkontinuitású, továbbá a geokémiai (meteorikus) és a geofizikai modellekkel foglalkoztunk. Az egyes modellek (relatív) tehetetlenségi nyomatókára vonatkozó numerikus eredmények figyelembevételével megállapítottuk, hogy a számításba vett Föld-modellek közül a Bullen-félék tekinthetők a legmegfelelőbbnek (ezek közül is az 1953/5 jelzésű), azzal a kiegészítéssel, hogy a Föld magja — Ramsey feltevésének megfelelően — *fémes állapotban* van.

Ismeretes, hogy a Föld belső szerkezetére vonatkozó legkonkrétebb megállapításokhoz a szeizmikus hullámok terjedési sajátosságainak elemzésével juthatunk el. Kiegészítő-jellegű adatokat szolgáltathatnak azonban a külső földköpeny bizonyos tulajdonságait illetően a földrengéshézagok mélységszerinti eloszlásával kapcsolatos vizsgálatok is.

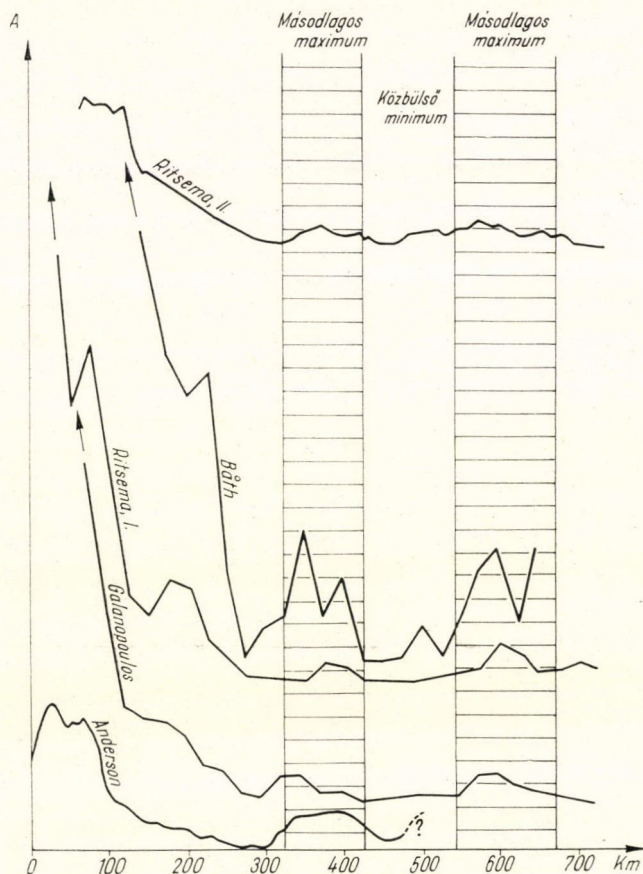
1. A külső földköpeny szerkezetére vonatkozó empirikus ismeretek és a nagyméretű földrengések mélység — felszabadult energia összefüggése

Az elmúlt esztendőkből több szerző [4, 5, 6, 7, 8] foglalkozott azzal a kérdéssel, hogy mekkora az egyes mélységzónákra jellemző szeizmikus energiaszabadulás, deformáció-feloldódás, vagy mekkora az előforduló rengéshézagok száma a fészkek mélység függvényében. Így például Anderson a nagy rengések évi számát, az egész Földre vonatkozóan vizsgálta (1. ábra), Båth az 1918—1952 közötti időszak nagyméretű ($M \geq 7,0$) rengéseinek deformáció-feloldódás — mélység diagrammját készítette el; Galanopoulos pedig az 1904 és 1952 között kipattant rengésekre vonatkozóan hajtott végre ugyanilyen vizsgálatot. A fentebb említett M a földrengés-magnitúdót jelenti. A magnitúdó a felszabadult földrengésenergiával logaritmikus arányban álló mennyiség, amely gyakorlatilag a szeizmográfok észlelésekből határozható meg. A deformáció-feloldódás mértéke a felszabadult szeizmikus energia négyzetgyökével arányos.

Ritsema a deformáció-feloldódás mélységfüggését nemcsak az egész Földre, hanem speciálisan a Szundra-ívre vonatkozóan is megvizsgálta.

* Érkezett 1964. nov. 25.

Ezeknek a munkáknak folyamán a Föld belsejét mintegy 730 km mélységig sikerült „feltérképezni”. Ismeretes, hogy a legmélyebbről származó rengések fészke 700—730 km mélységben helyezkedett el.



1. ábra. A szeizmikus aktivitás (A) a fészekmélység függvényében, különböző szerzők vizsgálatai szerint. *Anderson*: a nagy rengések évi száma, az egész Földre vonatkozóan. *Galanopoulos*: az 1904—1952 között kipattant rengések során bekövetkezett deformáció-feloldódás, az egész Földre vonatkozóan. *Ritsema, I.*: a deformáció-feloldódás menete a mélység függvényében, a Szunda-ívre és környékére. *Báth*: az 1918—1952 közötti időszak 7,0 magnitúdójú és annál nagyobb méretű rengéseinek deformáció-feloldódás — mélység diagramja, az egész Földre. *Ritsema, II.*: a 6,0 és 7,0 magnitúdó közötti rengések számának változása a mélység szerint, az egész Földre. Figyelemre méltó, hogy a másodlagos maximumok és a közbülső minimum valamennyi görbén közelítőleg azonos mélységben található (vö.: 2. ábra).

A jelen sorok írója a deformáció-feloldódás helyett a ténylegesen felszabadult totális szeizmikus energia mélységszerinti eloszlását vizsgálta meg [3], amelyet itt még kiegészítünk az egy rengésre vonatkozó átlagenergia mélységeloszlásának ismertetésével. Az egész világon 1896. január 1. és 1963. december 31. között kipattant

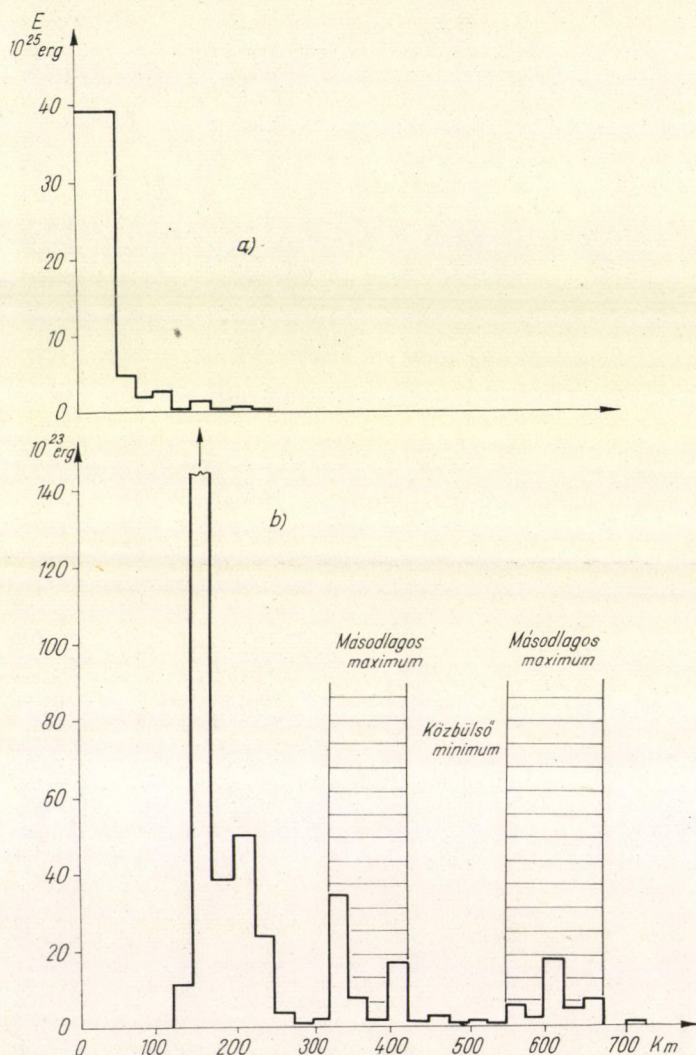
nagyméretű rengések adatait dolgoztuk fel, mégpedig a következő megoszlásban:
(összesen 1389 rengés)

1896. január 1.—1903. december 31. között:

az összes, 8,0 vagy annál nagyobb magnitúdójú földrengés adatai szerepelnek;

1904. január 1.—1963. december 31. között:

az összes, 6,9, vagy annál nagyobb magnitúdójú földrengés adatai szerepelnek.



2. ábra. Az 1896. január 1.—1963. december 31. között kipattant nagyméretű földrengések során felszabadult szeizmikus energia eloszlása a fészekmélység függvényében, az egész Földre vonatkozóan. A másodlagos maximumok és a közbülső minimum helye pontosan megegyezik az 1. ábrán tapasztalhatóval. a) 0—250 km mélységek között; b) 250—725 km mélységek között.

A különböző vizsgálatok eredményeit összehasonlítva (2. ábra) megállapíthatjuk, hogy a maximális tevékenység övezetét a földkéreg, és a földköpeny legfelső zónája képviseli. 100–300 km mélységek között a tevékenység mértéke a mélység növekedésének megfelelően, nagyjából exponenciálisan csökken. Kb. 325–425 km mélységek között másodlagos maximum, 425–550 km között közbülső minimum, 550–625 km között pedig újabb másodlagos maximum található.

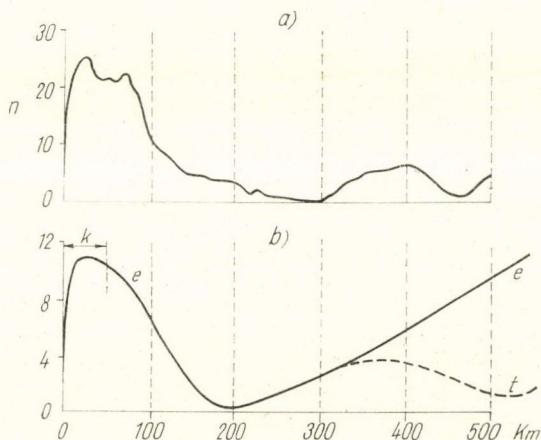
Galanopoulos véleményéhez csatlakozva [6] arra az álláspontra helyezkedhetünk, hogy a másodlagos maximumok mélységszintjében a földköpeny anyaga merevebb, mint a közbülső minimum zónájában. Ez utóbbi övezetben kevésbé áll fenn a mechanikai feszültségek, deformációk felgyülemelésének lehetősége.

Anderson rámutat arra [4], hogy a földrengések mélységszerinti eloszlása csak kb. 200 km mélységig felel meg a Föld felső köpenyének merevségére vonatkozó, laboratóriumi kísérletek alapján szerzett ismereteknek. Ennek az az oka, hogy a laboratóriumokban mind ez ideig legfeljebb 50 km mélységnek megfelelő nyomást sikerült mesterséges úton létrehozni, amelyeknek alapján az 50 és 500 km mélységek közötti szakaszra extrapoláltak. Amint a földrengések eloszlásképe mutatja, ez az extrapoláció nem volt megbízható (3. ábra).

Fentebb említettük, hogy megvizsgáltuk az egy rengésre jutó átlagenergia mélységszerinti eloszlásának kérdését (4. ábra). Az így kapott grafikonon teljesen más kép bontakozik ki előttünk, mint amilyent az 1. és 2. ábrák szemléltettek. A számítás az

$$E^* = E/n \quad (1)$$

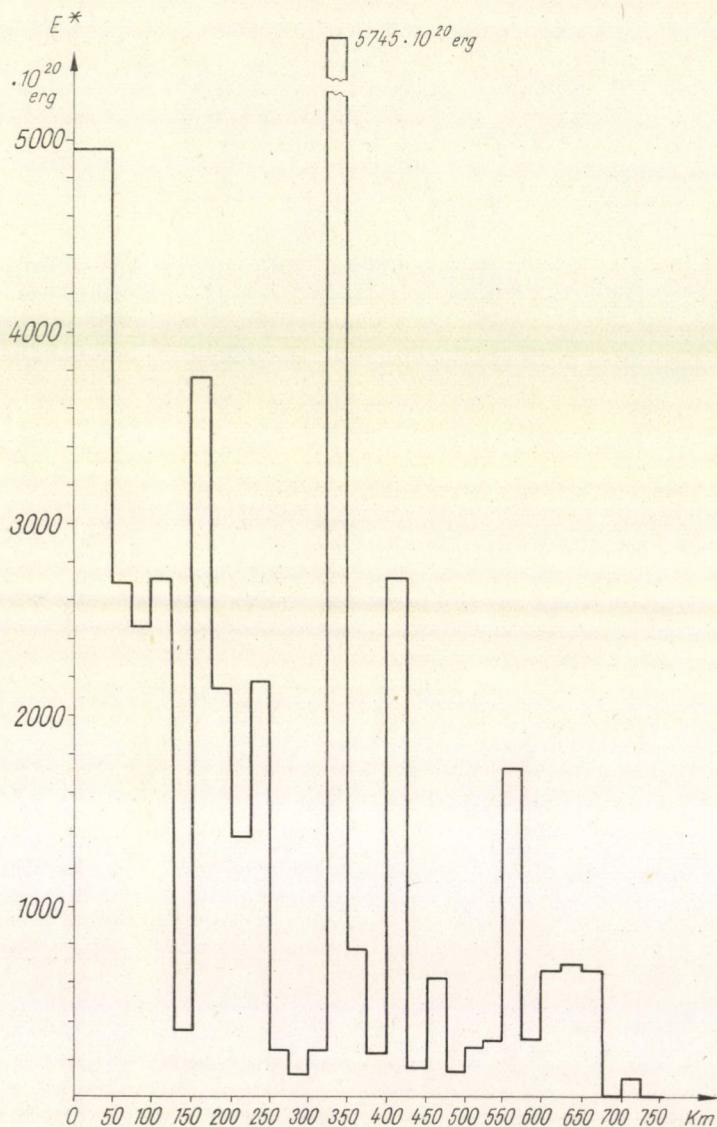
képlet alapján történt, ahol E^* egy adott mélységszintre vonatkozó átlagenergiát jelent, továbbá E az ugyanezen mélységszintben kipattant n számú rengés összesített energiája a vizsgált időszakban.



3. ábra. a) A nagy rengések évi számának (n) változása a mélységgel, Anderson szerint, az egész Földre vonatkozóan. b) A felső köpeny merevségét (m) kifejező görbe. Vízszintes tengely: mélység, kilométerben. Függőleges tengely: ezer atmoszféra. k -szakasz: laboratóriumi kísérletek alapján. e -szakasz: extrapoláció. t -szakasz: a szeizmikus aktivitásnak jobban megfelelő eloszlás.

Az egy rengésre jutó E^* átlagenergia mélységszerinti eloszlását kifejező grafikonon igen feltűnő a 325–350 km mélységek között tapasztalható kiugró maximum, amely tulajdonképpen egyetlen nagyméretű rengésnek (1906. január 21, 34° N, 138° E, $M = 8,4$, $h = 340$ km) tulajdonítható. Ez volt a legnagyobb energiájú mélyfészkes rengés, amelyet valaha is észleltek; a felszabadult energia lényegesen meghaladta az 1906. áprilisi kaliforniai (San Francisco) rengés energiáját.

A szóban forgó rengés Japánban, Osaka környékén pattant ki. A felszabadult energia szokatlan nagysága egyértelműen utal arra, hogy a rengést megelőzően az említett terület alatt kb. 340 km mélységben igen nagyméretű rugalmas alakváltozás (mechanikai feszültségfelhalmozódás) történt, következésképpen Japán alatt ebben



4. ábra. Az egy rengésre jutó átlagenergia eloszlása a mélység függvényében, az egész Földre vonatkozóan. (A 2. és 4. ábrán a 0—50 km mélységek közötti rengésadatok együttesen szerepelnek, más mélységeknél 25 km-enként kerültek ábrázolásra).

a mélységben a földköpeny valószínűleg merevebb, mint bárhol másutt a Földön. *A földköpeny merevsége tehát nem csupán vertikálisan, hanem horizontálisan is változik.*

2. A Föld belső hőmérsékleteloszlásának kérdése

A Föld belső szerkezetével kapcsolatban a termális tulajdonságok a legkevésbé ismertek. Az eddigiekben a Földet „hideg” égitestnek tekintettük, abban az értelemben, hogy *felépítését elsősorban a nyomás- és a sűrűségeloszlás határozza meg*, míg a hőmérsékleteloszlás szerepe másodrangú. Mindazonáltal a bolygónk belső szerkezetével foglalkozó tanulmány sorozat nem lenne teljes, ha nem térnénk ki a hőmérsékleteloszlás kérdésére.

A Föld keletkezésével kapcsolatos elméletek többsége megegyezik abban, hogy bolygónk már átment egy olvadt állapoton, még mielőtt különböző rétegekre tagolódott volna. Ha a Föld a Napból szakadt ki —, amint ez az f gravitációs együttható időfüggése esetén szükségszerűen következik, — akkor az eredeti gáztömeg viszonylag rövid idő alatt cseppfolyósodott, majd később a felszíni réteg megszilárdult. Ha viszont a Föld hideg úton keletkezett, akkor a radioaktív eredetű hő felgyülemzése miatt kellett felmelegednie és megolvadnia. Amint a Föld öregedett és a radioaktív elemek mennyisége csökkent, bolygónk felülete úgy hűlt le és szilárdult meg fokozatosan. *Birch* szerint a megolvadáshoz szükséges idő nagyságrendileg akkora lehetett, mint a Föld anyagát alkotó meteorikus anyag kezdeti összegyülemlésének (közelebb-ről egyébként meg nem határozható) ideje.

Ezzel a feltevessel szemben *Jacobs* hozott fel bizonyos ellenérveket [9]. Szerinte a radioaktív elemek koncentrációja meglehetősen bizonytalanul ismert, különösen a nagyobb mélységekben, s azok a becslések, amelyek *Birchtől* és *Urrytól* származnak, túlságosan magas értékekhez vezettek. *Jacobs* véleménye szerint kérdéses, hogy hideg úton történt keletkezés esetén teljes megolvadás egyáltalán bekövetkezhetett-e az eddigi földtörténet során?

Ehhez a szemponthoz viszont hozzátehetjük, hogy ha a radioaktív elemek az ősidőkben a földköpeny bizonyos részeiben koncentráálódtak is, az időközben megindult *konvekciós áramlások* ezeket a koncentrációkat feltétlenül megbontották már. *Griggs* szerint egy-egy magmaáramlási ciklus kb. 55—60 millió évig tart, amelyet félmilliárd esztendő nyugalmi állapot követ. Amennyiben a Föld életkora 4500 millió év, akkor nyolc teljes áramlási ciklus játszódott már le és a radioaktív elemek statisztikusan egyenletesen keveredtek el a földköpenynek azokban a rétegeiben, ahol a nagyarányú magmaáramlások végbementek. A jelenlegi állapotban tehát *a köpeny minden számbajövő, mélyebben fekvő részében nagyjából azonos lehet a radioaktív hőtermelés mértéke*. Nem mondhatjuk el azonban ugyanezt a köpeny külső részéről (egybehangzásban a földrengések eloszlásával kapcsolatban írtakkal). A kéreg alsó határa és a 980 km mélységben húzódó *Repetti-féle* szeizmikus felület közötti szakaszon nagyobbarányú, permanens magmaáramlások valószínűleg nem történtek és így áramláskeltette keveredés sem ment végbe. Erre utalnak *a vulkánok magmatartályai*, amelyekben az anyag minden valószínűség szerint félfolyós állapotban van. Hawaii alatt a magmatartályok 40—50 km mélységben helyezkednek el, Kamcsatka alatt 60 km mélységben, a japáni Izu-szigetcsoporthoz át a Csendes-óceán felől a Japán-tenger felé haladva a magmatartályok mélysége 50 km-től egészen 400 km-ig növekedik. A vulkanológusok általában úgy vélik, hogy a magmatartályok

belsejében az anyag azért maradhat meg félfolyós állapotban, mert a radioaktív elemek koncentrációja miatt magas a hőtermelés foka. Ha nagyméretű, permanens magmaáramlások ebben a viszonylag sekély mélységben, a külső köpenyben is lejátszódnának, akkor ezek a radioaktív gócok már megszűntek volna.

A *hőmérsékleti gradiens* a mélységgel igen gyorsan csökken. Ennek indokolását — *Howell* gondolatmenetét követve [10] — az alábbiakban adhatjuk meg.

Tekintsünk egy $\Delta\zeta$ vastagságú héjat egy gömb belsejében. Legyen a gömb sugara R , a héj külső sugara ζ_1 , belső sugara pedig ζ_2 . Tegyük fel, hogy $R = \zeta_1$. A héj átlagos sugarának definíciója:

$$\zeta = \frac{\zeta_1 + \zeta_2}{2}. \quad (2)$$

Az ebben a héjban keletkező radioaktív eredetű hő arányos egyrészt a héj

$$V = 4\pi \int_{\Delta\zeta} \zeta^2 d\zeta \quad (3)$$

térfogatával, másrészt pedig a radioaktív anyagok koncentrációjával, amelyet a szóban forgó héjban σ szimbolizál. A gömbben ekkor

$$Q \sim 4\pi \int_0^R \sigma \zeta^2 d\zeta \quad (4)$$

totális hőmennyiség keletkezik. A külső térbe kisugárzódó hő mennyisége a gömb felületével arányos. Ezért a területegységenként felszabaduló q hőmennyiség arányos a keletkezett hő és a területegységeken kifejezett gömbfelszín hányadosával. Ha σ a mélységtől független és a hőmérséklet is állandó, akkor

$$q \sim \frac{\sigma \int_0^R \zeta^2 d\zeta}{R^2} = \sigma \frac{R}{3}. \quad (5)$$

Jelölje a konduktivitást ε , ekkor a *hőmérsékleti gradiens*:

$$\frac{dT}{dR} \sim \frac{\sigma \int_0^R \zeta^2 d\zeta}{\varepsilon R^2} = \sigma \frac{R}{3\varepsilon}. \quad (6)$$

Az

$$R \rightarrow 0$$

esetben

$$\frac{dT}{dR} \rightarrow 0,$$

mégpedig gyors ütemben.

A fenti megfontolások arra az esetre érvényesek, ha a köpenyt szilárdnak tételezzük fel. A *Poisson*-állandó értéke a földköpenyben mindenütt kisebb 0,5-nél, amely utóbbi a folyadékszerűen viselkedő közegekre érvényes. Ez nincs ellentétben

azzal, hogy a köpeny mélyebben fekvő részében konvekciós áramlások fordulhatnak elő, mert a konvekciós áramlások a viszkozitástól függenek, nem pedig a folyadék-szerűség következményei.

Mint hogy a konvekciós áramlások hőt szállítanak, hozzájárulnak egy bizonyos hővesztességhez. Ez a gradiens csökkenését eredményezi. Mindazonáltal a gradiens zérussá vagy negatívvá sehol sem válhat a Föld belsejében, tehát a hőmérséklet — befelé haladva — okvetlenül növekedik.

Ha a hőmérsékleti gradiens nem változna a mélységgel és felszíni értéke (átlagban, amelytől helyenként természetesen jelentős eltérések fordulhatnak elő) 1°C 30 méterenként, akkor a Föld középpontjában közelítőleg $2 \cdot 10^3^\circ\text{C}$ -os hőség uralkodna. A tényleges hőmérséklet azonban ennél sokkalta alacsonyabb. *Birch* szerint a kontinensek alatt, a felszíntől kb. 30 km mélységben a hőmérséklet 500°C körüli; 100 km mélységben 1100°C ; 300 km-nél valamelyest meghaladja az 1600°C -ot, 800 km mélységben pedig 1900°C . *Gutenberg* 1951-ben végzett számításai szerint a Föld centrálhőmérséklete alig haladja meg a 2000°C -ot. Ez mindenesetre sokkal alacsonyabb annál, mint amilyen hőmérsékletet a kutatók néhány évtizeddel ezelőtt feltételeztek.

Feljegyzés

A Magyar Fizikai Folyóirat 1963. évi évfolyamának 12. kötet, 83—87 oldalain tanulmányt közöltünk „*A Mars belső szerkezetéről*” címmel. A dolgozat 1962. november 6-án érkezett a Szerkesztőbizottsághoz.

A nevezett tanulmányban számításokat végeztünk a Mars felépítésére, elsősorban a bolygó magjára vonatkozóan és megállapítottuk, hogy az égitestnek sem mágneses tere, sem pedig (fémes fázisú) magja nem lehetséges, mert a fémes fázishoz szükséges nyomás nem valósul meg a Mars belsejében. *A mágneses térre vonatkozó fejtegetést az amerikai Mariner-4 kozmikus űrhajó mérései 1965. július 15-én igazolták.* Kitént, hogy ha a Marsnak egyáltalán lehetséges is mágneses tere, akkor annak térereje még a földmágneses térerősség egytizedét sem éri el. A megfigyelt, igen gyenge mágneses tér minden valószínűség szerint nem globális, dipól-jellegű planetáris mágnességnek, hanem lokális jellegű, rendezetlen anomáliatérnek tulajdonítható.

A Mariner-4 mérései így közvetetten igazolták, hogy a Marsnak — a számításokkal egyezésben — nincs fémes magja.

A kísérlet abból a szempontból is jelentős eredményként könyvelhető el, hogy eldöntötte a rotáció és a mágneses tér összefüggésének kérdését. Számos szerző képviselte azt az álláspontot, hogy az égitestek rotációja és mágneses tere rendkívül szorosan összefügg egymással, amennyiben a gyors forgás nagy mágneses teret eredményez, illetve azzal jár együtt. Az ilyen nézetet valló kutatók arra hivatkoztak, hogy a Holdnál és a Vénusznál az űrhajók nem észleltek számottevő mágneses teret — mindkét égitest rotációja igen lassú, — ezzel szemben a gyorsan forgó Földnek erős, az igen gyorsan rotáló óriásbolygóknak (Jupiter és Szaturnusz), rendkívül erős mágneses terük van. A csillagok esetében is hasonló a helyzet; a legerősebb mágneses térrel rendelkező csillagok rotálnak a leggyorsabban.

Ezt a feltételezett összefüggést a Mariner-4 mérései most *megcáfolták*. A Mars tengelykörüli forgásideje 24 óra 37 perc, a rotáció tehát gyorsnak minősül. Az égi-

testnek azonban — ennek ellenére — sincs mágneses tere. Azoknak a kutatóknak álláspontját kell tehát helytállónak minősítenünk, akiknek véleménye szerint *a bolygók mágneses terének kialakulását elsősorban a belső szerkezet sajátosságaira — fémes mag létezésére — kell visszavezetni.*

IRODALOM

- [1] Hédervári P.: A Föld belső szerkezetéről. I. rész. MTA Magyar Fizikai Folyóirat, 12, 223, 1964.
- [2] Hédervári P.: A Föld belső szerkezetéről. II. rész. MTA Magyar Fizikai Folyóirat, 12, 1964.
- [3] Hédervári P.: On the Distribution of Energy and Number of Earthquakes in Accordance with the Focal Depth. Annali di Geofisica (Roma), Vol. XVII. No. 3., 1964.
- [4] Anderson, D. L.: The Plastic Layer of the Earth's Mantle. Scientific American (San Francisco), 1962/7.
- [5] Báth, M., Duda, S. J.: Strain Release in Relation to Focal Depth. Geofisica Pura e Applicata (Roma), Vol. 56., 1963.
- [6] Galanopoulos, A. G.: Note on Strain Release Variation with Depth. Annali di Geofisica (Roma), Vol. XVII. No. 3., 1964.
- [7] Gutenberg, B.—Richter, C. F.: Seismicity of the Earth. (IInd Edition). Princeton, 1954.
- [8] Ritsema, A. R.: The Seismicity of the Sunda Arc in Space and Time. Indonesian Journal of Natural Sciences (Bandung), 1954.
- [9] Jacobs, J. A.: The Earth's Interior. Thermal Properties. Encyclopedia of Physics, Geophysics I. Berlin, 1956.
- [10] Howell, B. F.: Introduction to Geophysics. New York, 1959.

AZ ELEMI RÉSZEK UNITÉR SZIMMETRIÁJA

J. A. SZMOROGYINSZKIJ

1. §. Bevezetés

A mai fizika — az elemi részek jelenségeit kutatva a világban — a kísérleti anyag törvényszerűségeit megmaradási törvények rövid alakjában fogalmazza meg. A klasszikus fizika csak a mechanika néhány alapvető megmaradási törvényét ismerte; a kvantumfizikában, és különösen az elemi részek fizikájában már egész sor ilyen törvényszerűség gyűlt össze.

Lehet, hogy a megmaradási törvények nagy száma kapcsolatban van azzal, hogy még nem ismerjük azt a mélyebb mechanizmust, amely az elemi részeket produkáló sokféle folyamatot szabályozza. A jövőben valószínűleg bebizonyosodik majd, hogy a sokféle megmaradási törvényt közös ok kapcsolja össze, és hogy ezek a tér és idő néhány általános szimmetriájának következményei. Azonban most még egymástól függetlennek látszanak, és tanulmányozásuk képezi a mai kutatómunka alapvető irányát.

Az elemirész-fizika megmaradási törvényeinek és a velük kapcsolatos szimmetriáknak jellemzője, hogy sok esetben nem bizonyulnak pontosaknak, csak közelítőnek. Ezzel kapcsolatban a jelenségek kutatásának egy új lehetősége jelent meg a fizikában, melyet az tesz lehetővé, hogy a szimmetriasértés sok esetben mennyiségileg kicsiny, és tulajdonságaira nézve eléggé egyszerű.

E szimmetriák egy példája az izotóp szimmetria, az ezt megsértő elektromágneses és gyenge kölcsönhatás jól ismert. Nemigen túlzunk, ha azt állítjuk, hogy a legérdekesebb eredményeket éppen akkor érték el a fizikában, amikor a szimmetriasértések törvényeit kiderítették. Ezt a csillagászati megfigyelések esetében is látni lehet. *Galilei* kiszámította, hogy a bolygók természetes körpályákon haladnak. A bolygópályák tengelyszimmetriájának megsértése, amit *Kepler* fedezett fel, a klasszikus mechanika megalkotásához vezetett. Az általános relativitáselmélet diadala volt a *Merkur* perihéliummozgásának felderítése, amely újabb szimmetriasértést jelentett, a klasszikus mechanikai pálya zártságának megsértését. A kvantumfizikában az új megmaradási törvények kérdése akkor merül fel, amikor kötött állapotban levő rendszerek szerkezetét igyekeznek megérteni. A hidrogénatom szintjeinek felfedezése vezetett Bohr modelljéhez. A szintek szisztematikus elrendeződése új szimmetriatulajdonságokkal kapcsolatosnak bizonyult, melyeket csak sok évvel később fogalmazott meg *Fok* (Szimmetriaelforgatások a négydimenziós világban).¹ Az a lehetőség, hogy a hidrogénatom tisztán csoportelméletileg leírható, az atom-

* Megjelent УФН, 84, 3, 1964.

¹ Az a tény, hogy a hidrogénatom szintjei nem a fizikai háromdimenziós térben szimmetriasértőek, nagyon tanulságos, mert ez majd számunkra kevésbé váratlanul fog jelenségeket előidézni az izotóp és unitér terekben.

fizika nagyon fontos jelensége, amelyet igazságtalanul el szoktak hanyagolni a kvantummechanika tananyagban.

A relativisztikus transzformációk szimmetriái és a velük kapcsolatos Pauli-elv lehetőséget adnak a sokelektronos atomok szintstruktúrájának megértésére.

A magfizikában az atommag szintjeinek kutatása vezetett a töltésinvariancia és az ezzel kapcsolatos izotóp tér felfedezésére. A részecskék és a mag izotóp spinje most éppoly megszokott valami, mint a mag közönséges spinje, vagy töltése. Az izotóp spin megmaradásának törvénye, amelyet 1937-ben fedezett fel Wigner, az elemi részek fizikájában tett szert nagy jelentőségre.

Amíg csak két nehéz részecske, a proton és a neutron voltak ismertek, nem kellett újabb kvantumszámokat bevezetni; de amikor felfedezték a hiperonokat, felmerült az a kérdés, mi lehet az oka nagy stabilitásuknak. 10^{-10} sec-os élettartamuk — a magfolyamatok gyorsaságához viszonyítva — nagyon nagy idő. Az elmélet megalkotásában — mint az atomelmélet történetében is — az első lépés a „főkvantumszám” bevezetése volt a barionszintek (így nevezhetjük a nukleonok és hiperonok összességét) rendszere számára. Ilyen főkvantumszámnak bizonyult a *Gell-Mann* és *Nishijima* által felfedezett S „ritkaság” (vagy az Y hipertöltés, mely S -nek és a B barionszámnak az összege).

Jelenleg fogalmunk sincs arról, hogy az erős kölcsönhatásnak milyen tulajdonságaival van kapcsolatban ez a kvantumszám. Nem tudjuk, független-e a többi tulajdonságoktól, melyeket a kvantummechanika és a relativitáselmélet írnak le, és az eredetét talán mélyebb elmélet fogja kideríteni; de talán ez is sokkal egyszerűbbnek bizonyul, a ritkaság csak a részecskéknek és annak a nem nagyon érthető alapnak a kölcsönhatását írja le talán tömören, amelyet fizikai vákuumnak szokás nevezni. De, ha nem is így lenne, a ritkaság felfedezése kétségtelenül az elemirészfizika fejlődésének egyik legjelentősebb szakasza.

A „ritkaságnak” az elméletbe való beépítése céljából szükséges volt az izotóp spin sémájának kibővítése. Az első ilyen irányú kísérlet *Sakatától* [$A1, A2$], valamint *Markottól* [$A4$] és *Okuntól* [$A3$] származik, akik egy U_3 unitér vektorrendszert (proton-neutron- A -hiperon) vizsgáltak. Azonban, az összes hiperonoknak csak három alapvető vektorba való besorolása nem volt elég radikális megoldás, és az elmélet igazi sikerét a *Gell-Mann* és *Ne'eman* által bevezetett SU_3 séma hozta meg. Ez a séma, melyet eleinte nagyon tartózkodóan fogadtak, nemsokára a leghatékonyabbnak bizonyult. Az elmélet diadala az általa megjósolt Ω -mezon felfedezése volt [$G1$].

Gell-Mann [$C2, 3$] és *Ne'eman* [$C1$] rendszerét az első szerzők „nyolcas útnak” — „eightfold way” — nevezték el.² Érdekes, hogy az SU_3 csoporttal írható le a háromdimenziós harmonikus oszcillátor szintjeinek szimmetriája.

Noha a hiperonok tömegkülönbségei — melyek az SU_3 -ban nullával egyenlők — nagyok, kiderült, hogy az SU_3 szimmetriát megsértő kölcsönhatás szimmetriájára vonatkozó szerfelett egyszerű feltevések lehetővé teszik a tényleges tömegfelhasadás leírását. Sőt, mi több, az izotóp multiplettek felhasadása is beleillett egy egyszerű sémába.

² A csoport elnevezése egy Buddháról és a szenvedések megsemmisítéséhez vezető nyolc útról szóló legendával kapcsolatos. Ez a nyolc út: helyes tekintet, helyes szándék, helyes szavak, helyes cselekvés, helyes élet, helyes erőfeszítések, helyes gondolkodás és helyes koncentráció.

Az elmélet sikere állandóan növekszik. A rendelkezésre álló adatok valószínűvé teszik, hogy a gyenge kölcsönhatás és az elemi részek reakcióinak kutatásában jelentős előrehaladás fog bekövetkezni.

Az a rengeteg részecske és rezonancia, amelyek két évvel ezelőtt rendszerteleneknek látszottak, már most beleilleszthető három oktett és egy dekaplet esztétikus rendszerébe (nem számítva az antibarionokat, melyek még egy oktettet és egy dekapletet alkotnak), így az elemi részek „passziánszának” most minden alapja megvan a „kimenésre”.

Az aránylag egyszerű leírásmód sikere megnöveli azt a reményt, hogy a részecskéknek a vákuummal való kölcsönhatását is le tudjuk majd írni, talán aránylag egyszerű formában; ennek a kiinduló pontja lehet a tömegfelhasadás leírása egy effektív térrel történő multipól kölcsönhatás segítségével.

Ha nem is így lenne, az unitér szimmetria elmélete nagyon is szükséges apparátus, amelynek ma már széles körben ismertnek kell lenni. Az unitér modell nézőpontjából mégis érthetetlen, hogy miért nincsenek olyan részecskék, amelyek a minimális kiterjedés elvének megfelelően azoknak a háromkomponensű spinoroknak felelnek meg, amelyek Sakata elméletében alapvetőek voltak. A helyzet itt éppen olyan, mint amilyen a kvantummechanikában lenne, ha nem léteznének $1/2$ spinű részecskék. Ilyen részecskék bevezetésére Gell-Mann tett egy kísérletet (kvarkok) [E 1], ezek a részecskék azonban kísérletileg nem voltak megfigyelhetők [E 2].

Schwinger fejlesztett ki egy, megfigyelhetetlen részecskéket feltételező elméletet [F 2]. Mindaddig azonban korai lenne ennek az elmélet számára fontos kérdésnek a kielégítő megoldásáról beszélni.

Jelen cikk elemi bevezetés az unitér szimmetria elméletébe. Kifejtjük benne az SU_3 csoporttal kapcsolatos tenzoralgebra alapjait.

Ez úgy fog történni, hogy aláhúzzuk a forgáscsoport közönséges tenzoralgebrájával, vagy, ami ugyanaz, a síkbeli unitér csoporttal — SU_2 csoport — való analógiát. Ezért a magyarázat az SU_2 csoport tulajdonságainak rövid áttekintésével kezdődik. A következőkben, a 3. és 4. §-ban beszélünk az SU_3 tenzorokról.

Az elemi részek unitér szimmetriájának elmélete az 5. §-ban kezdődik, ahol leírjuk a multiplettek tulajdonságait. Ebben a paragrafusban a multiplettek két osztályát mutatjuk be: 1. fermionmultiplettek, melyeket komplex mátrixokkal írunk le, ezekből négy ismeretes: oktett, dekuplett és ezek antimultiplettjei; 2. bozonmultiplettek, melyeket hermitikus mátrixok írnak le, 2 ismeretes belőlük, hozzájuk számíthatjuk még az unitér skalár ω -mezont is.

A 6. és 7. §-ban a tömegfelhasadás formuláit hozzuk ki. Az intervallum-szabály bámulatosan emlékeztet a Zeeman-effektus elemi elméletének formulájára. Az atomspektroszkópiával való analógia annyira nyilvánvaló, hogy felmerül a remény a felhasadásnak valamilyen kvázimágneses tér bevezetésével történő leírására. Így effektíve leírnánk a multipletteknek a vákuummal való kölcsönhatását. Az ilyen teret úgy lehet tárgyalni, mint a mezontereket [F 3, F 4].

Gyakorlatilag mindent, amit a tömegfelhasadás formuláiról elmondhatunk, a (7, 16) formula levezetésére lehet korlátozni, amely praktikusán minden eredményt tartalmaz. Ezek az eredmények a barionoktett három (6, 7), (7, 7), (7, 8); a mezonoktett két (6, 19), (6, 28) és a dekuplett egy (7, 14) intervallumformulájában foglalhatók össze.

Az intervallumszabályon kívül még számos más eredmény is van, melyek a mágneses momentumokkal, alak-faktorokkal, reakciókkal kapcsolatosak.

Alapvetően érdekes a gyenge kölcsönhatás fejlődésében levő elmélete. Ezek a témák külön cikket érdemelnek.

Az utolsó megjegyzés az irodalomra vonatkozik. Minthogy az unitér szimmetriával kapcsolatos cikkek száma igen nagy, kísérletet tettünk aránylag nem túl sok olyan cikk kiválasztására, amelyek az elképzelések és eredmények nagy részét tartalmazzák, azok közül, melyeket 1964. jún. 1-ig jelentettek meg. Ezekben a cikkekben az olvasó további irodalmi utalásokat is talál.

2. §. Az izotóp spin

A magerők töltésfüggetlensége arra vezet, hogy a nukleonok és más alapvető részecskék az izotóp spin segítségével osztályozhatók megfelelően. Ha elhanyagoljuk az elektromágneses teret és a gyenge kölcsönhatást, akkor a rendszer tulajdonságait csak a T izotóp spin határozza meg, és nem függenek ezek az izotóp spin T_3 vetületétől.

Az elektromágneses tér és a gyenge kölcsönhatás a szintek „felhasadását” idézik elő, úgyhogy a rendszer tulajdonságai függenek az izotóp spin T_3 vetületétől.

A proton és neutron hullámfüggvényét kétkomponensű függvényspinor írja le³

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \Psi_{-1/2} \\ \Psi_{1/2} \end{pmatrix}. \quad (2, 1)$$

Az izotóp spin vetületének $T_3 = 1/2$ értéke a p (proton) töltött állapotnak, a $T_3 = -1/2$ érték az n (neutron) semleges állapotnak felel meg:

$$\Psi = \begin{pmatrix} n \\ p \end{pmatrix}. \quad (2, 2)$$

A függvény adjungáltját a

$$\bar{\Psi} = (\bar{\Psi}_{-1/2}, \bar{\Psi}_{+1/2}), \quad (2, 3)$$

vagy a

$$\bar{\Psi} = (\bar{n}, \bar{p}) \quad (2, 4)$$

sorvektorokkal fogjuk jelölni. A (2, 1) függvényt lineáris transzformációnak³ vehetjük alá az U mátrix segítségével:

$$\Psi' = U\Psi = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{-1/2} \\ \Psi_{1/2} \end{pmatrix}. \quad (2, 5)$$

Ha fennáll az izotóp invariancia, akkor az új Ψ' függvény komponensei ugyanolyan jól megfelelnek a két töltésállapot leírására, mint a Ψ függvény komponensei, melyekből kiindultunk. Azonban ezeknek az új függvényeknek ortogonálisnak és normáltaknak kell lenniök. Ez a követelmény teljesül, ha U mátrix unitér, vagyis, ha inverz mátrixa megegyezik a transzponált konjugálttal (adjungált mátrix):

$$U^{-1} = U^+, \quad UU^+ = 1. \quad (2, 6)$$

³ A komponensek mindegyike függ még a koordinátáktól és spinektől is, amelyeket itt nem fogunk feltüntetni.

Ezek a követelmények teljesülnek, ha U mátrix

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \quad (2, 7)$$

alakú, ahol

$$|a|^2 + |s|^2 = 1. \quad (2, 8)$$

A (2, 8) feltétel azt is jelenti, hogy a mátrix determinánsa 1.

Egy mátrix unitér marad, ha megszorozzuk $\exp(i\varphi)$ -vel; a determináns az egységgel marad egyenlő, ha $\varphi = 0$ vagy π . Ha Ψ az U mátrix segítségével transzformálódik, akkor ΨU^+ mátrix segítségével, ahol a mátrixszal való szorzás balról történik:

$$\Psi' = U\Psi, \quad (2, 9)$$

$$\bar{\Psi}' = \bar{\Psi}U^+. \quad (2, 10)$$

Ha az indexeket kiírjuk, akkor a (2, 9) szerint transzformálódó spinorok indexei fent vannak, és a spinorokat kontravariánsoknak nevezzük:

$$\Psi'^\alpha = U^\alpha_\beta \Psi^\beta \quad (2, 11)$$

(az egyes indexek szerint összegezni kell!)

A (2, 10) szerint transzformálódó spinorokat alsó indexekkel jelöljük, és kovariánsoknak nevezzük:

$$\bar{\Psi}'_\beta = (U^+)^\alpha_\beta \bar{\Psi}_\alpha. \quad (2, 12)$$

Amennyiben az indexeket kiírjuk, a szorzók sorrendje a formula jobb oldalán lényegtelen.

A leírt formulákból következik, hogy a (2, 9) és (2, 10) transzformációk nem változtatják meg a skalár szorzat értékét:

$$(\bar{\Psi}', \Psi') = (\bar{\Psi}U^+, U\Psi) = (\bar{\Psi}, \Psi). \quad (2, 13)$$

A (2, 13) képlet az unitér transzformáció meghatározására szolgál.

Bevezetjük az

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2, 14)$$

antiszimmetrikus mátrixot, és inverzét:

$$\varepsilon^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2, 15)$$

Ekkor minden kontravariáns spinort kifejezhetünk kovariánssal indexlehúzás segítségével:

$$\Psi_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta} \Psi^\beta. \quad (2, 16)$$

Megfordítva, indexfelemeléssel kovariáns spinorból kontravariánst alkothatunk:

$$\Psi^\alpha = \varepsilon^{\alpha\beta} \Psi_\beta. \quad (2, 17)$$

Innen az következik, hogy a kontravariáns és kovariáns komponensek közti különbség tisztán formális, és

$$\Psi_1 = -\Psi^2, \quad (2, 18)$$

$$\Psi_2 = \Psi^1. \quad (2, 19)$$

Az $\varepsilon^{\alpha\beta}$ mátrixot nem változtatja meg az unitér transzformáció:

$$\varepsilon = U\varepsilon U^{-1}. \quad (2, 20)$$

Ezt az egyenletet könnyű ellenőrizni, ez egyszerűen annak következménye, hogy U determinánsa eggyel egyenlő.

Ily módon, ha

$$\Psi^x = \begin{pmatrix} n \\ p \end{pmatrix}, \quad (2, 21)$$

akkor

$$\Psi_x = \begin{pmatrix} -p \\ n \end{pmatrix}. \quad (2, 22)$$

Megjegyezzük ezenkívül, hogy

$$\Psi^x \Psi_x = 0, \quad (2, 23)$$

és hogy az $\varepsilon^{\alpha\beta}$ mátrix a metrikus tenzor szerepét játssza.

Éppúgy, mint a rendes tenzoralképpben, bevezetünk többindexes tenzorokat. Az

$$A_b^a = \begin{pmatrix} A_1^1 & A_2^1 \\ A_1^2 & A_2^2 \end{pmatrix} \quad (2, 24)$$

másodrendű vegyes tenzor úgy transzformálódik, mint két, egy kontravariáns és egy kovariáns spinor szorzata. E tenzor

$$\text{Sp } A = A_1^1 + A_2^2 \quad (2, 25)$$

spurja szemmel láthatóan skalár, és a T transzformációk változatlanul hagyják.

$$A_b^a = \begin{pmatrix} A_1^1 & A_2^1 \\ A_1^2 & -A_1^1 \end{pmatrix} \quad (2, 26)$$

tenzor már irreducibilis. Ez a tenzor a háromdimenziós tér egy vektorával ekvivalens. A hármas vektor és a (2,26) tenzor komponensei között a Pauli-mátrixok létesítenek kapcsolatot. Ha az A hármas vektort skalárisan szorozzuk a $\sigma(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ Pauli-vektorral, ezt kapjuk:

$$A_b^a = \begin{pmatrix} A_3 & A_1 - iA_2 \\ A_1 + iA_2 & -A_3 \end{pmatrix}. \quad (2, 27)$$

Most nem mutatjuk meg, hogy az A_b^a tenzor unitér transzformációi ekvivalensek az A vektornak a háromdimenziós térben való forgásával.

További tájékoztatás magasabbrendű tenzorokról számunkra itt nem szükséges.

Vegyük most figyelembe az elektromágneses teret. Ekkor az izotóp térben a 3. tengely kitüntetetté válik, minthogy az e tengelyre való vetület meghatározza a

töltésállapotot. Ebben az esetben a kölcsönhatás már nem lesz izotóp invariáns. A transzformációs mátrixok diagonálissá válnak, és az

$$U = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

alakba írhatók. z tengely körüli síkbeli forgást írnak le. Az R_2 kétdimenziós, egy-paraméteres forgásalcsoporthoz kapjuk. Az ennek a csoportnak megfelelő tenzor-algebrában eltűnik a felső és alsó indexek közötti különbség, és a fázisfaktoral való szorzás egységtranszformáció marad. Bizonyára érdemes emlékeztetni arra, hogy a mátrixok tulajdonságairól mondottakat a spinnel rendelkező részecske modelljével lehet illusztrálni, amikor a gömbi szimmetriát z tengely irányú mágneses tér elrontja.

A spin-tenzor fontos esete a T izotóp spin-operátor (vektor). (2,27)-nek megfelelően:

$$T = \begin{pmatrix} T_3 & T_- \\ T_+ & -T_3 \end{pmatrix}. \quad (2, 28)$$

E mátrix elemei az izotóp spin komponensei, amelyek maguk szintén mátrixok. Ezeknek a mátrixoknak az alakja (a sorok és oszlopok száma) függ a csoport ábrázolásától, azaz azoknak a részecskének a spinjétől, amelyeknek a hullámfüggvényére ezek a mátrixok hatnak.

Nukleon esetében $T = 1/2$, T komponensei a

$$T_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

mátrixok. Ezeknek a mátrixoknak segítségével például le lehet írni a gyenge kölcsönhatásban részt vevő (vektor- és pszeudovektor-) áramot. Így, a neutron β -bomlásáért felelős vektoráram az izotóparám J_+ -komponense:

$$I_{\alpha+} = \langle p | \gamma_\alpha (1 + \lambda \gamma_5) T_+ | n \rangle.$$

Itt tudomásul vettük, hogy a kezdeti n és a p végállapot közötti mátrixelem a gyenge kölcsönhatás $\gamma_\alpha (1 + \lambda \gamma_5)$ ($\lambda \approx 1,25$; γ_α és γ_5 a Dirac-mátrixok) rendes spin-indexekre ható operátorából és a T_+ izotóp-operátorból áll, mely a neutront protonná változtatja.

A T_- operátorral kapcsolatos J_- áramkomponens a pozitronbomlást írja le, a J_3 semleges komponens pedig, az általános kölcsönhatás elmélete szerint az elektromágneses áramban játszik szerepet. Ily módon, pl., a vektoráramot felírhatjuk a

$$V = \begin{pmatrix} V_3 & V_- \\ V_+ & -V_3 \end{pmatrix}$$

mátrixalakban. Itt minden elemnél oda kell gondolnunk a közönséges négyes Minkowski-tér komponensének kifratlan indexét. Visszatérve a (2,28) képlethez, meg-

jegyezzük, hogy $\text{Sp } T=0$, e mátrix determinánsa pedig:

$$\text{Det } \mathbf{T} = \frac{1}{2}(T_+ T_- + T_- T_+) + T_z = T^2$$

(a kiszámoláskor szimmetrizáltunk a T_- és T_+ elemek szerint, mivel ezek a mátrixok nem kommutálnak). Ez utóbbi képletből látjuk, hogy a determináns a transzformáció invariáns mátrixát adja, az izotóp spin négyzetét. Világos, hogy ez a képlet nem függ az ábrázolástól, vagyis igaz tetszőleges spinértékekre.

A teljesség kedvéért röviden leírjuk még a csoport kiterjesztését. Ha eltekintünk az uniteritás feltételétől, és csak a $\text{Det } \mathbf{U}=1$ unimodularitási feltételt tartjuk meg, akkor a mátrixok az $L_6(4)^4$ Lorentz-transzformációt írják le. Mivel ekkor $\mathbf{U}^+ \neq \mathbf{U}^{-1}$, azért a spinorok két típusa helyett a Lorentz-csoport tenzoralgebrájában négyfajta spinor van, melyek az \mathbf{U} , \mathbf{U}^{-1} , \mathbf{U}^+ és \mathbf{U}^{+1-1} mátrixokkal transzformálódnak. Ezeknek a típusoknak a leírására pontozott indexeket vezetünk még be, úgyhogy a transzformációkat így jelöljük:

$$\left. \begin{aligned} \Psi'^\alpha &= \mathbf{U}_\beta^\alpha \Psi^\beta, \\ \Psi'_\alpha &= (\mathbf{U}^{-1})_\alpha^\beta \Psi_\beta, \\ \Psi'^{\dot{\alpha}} &= (\mathbf{U}^+)_{\dot{\beta}}^{\dot{\alpha}} \Psi^{\dot{\beta}}, \\ \Psi'_{\dot{\alpha}} &= (\mathbf{U}^{+1-1})_{\dot{\alpha}}^{\dot{\beta}} \Psi_{\dot{\beta}}. \end{aligned} \right\} \quad (2, 29)$$

Az $L(4)$ tenzoralgebrában létezik az indexlehúzás és indexfelemelés művelete, éppúgy, mint az SU_2 algebrában. Ezért a Lorentz-csoportban az ábrázolást két szám jellemzi: a pontozott és a pontozatlan indexek száma. Ebben az algebrában a tenzort a négy Pauli-mátrix segítségével írjuk le: $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$ és σ_3 , ahol σ_0 egység-mátrix. Az

$$A_{\dot{\beta}}^{\dot{\alpha}} = \begin{pmatrix} t-z & x-iy \\ x+iy & t+z \end{pmatrix} \quad (2, 30)$$

tenzor felel meg a négyes vektornak; ennek transzformációja a Lorentz-transzformációval ekvivalens. Minthogy pontozott és pontozatlan indexek szerint nem szabad összegezni (vagyis ilyen összegezésnél nem keletkezik invariáns), a (2,30) tenzor spurját nem lehet minden koordinátarendszerben nullával egyenlővé tenni.

Az $L_6(4)$ Lorentz-csoportból az R_3 forgáscsoportba való átmenethez elegendő a pontozott és a pontozatlan indexeket egy kalap alá venni. Ekkor a tenzorból kiválik egy skalár — a spurja. Az ábrázolási mátrixokban csak diagonális komponenseket hagyva, az R_2 csoportba megyünk át. Így a csoport

$$L(4) \supset R_3 \supset R_2$$

redukcióját a tenzoralgebra megfelelő egyszerűsödése kíséri.

Befejezésül megmutatjuk, hogyan fejezhetők ki a tenzorkomponensek az izotóp spin vetületének értékével.

A p darab felső indexes tenzor $p/2 = T$ izotóp spinnek felel meg, mivel a tenzornak $p+1$ komponense van. Ha minden index 1-gyel egyenlő, akkor megállapodunk abban, hogy az ilyen tenzorkomponensnek $T_3 = -T = -p/2$ értéket tulajdonítunk.

⁴ A négydimenziós tér transzformációja, mely 6 paramétértől függ.

Akkor, ha egy tenzorkomponensnek $p(1)$ indexe 1, $p(2) = p - p(1)$ indexe pedig 2, úgy az ilyen komponensre:

$$T_3 = -T + p(2) = \frac{p(1) + p(2)}{2} + p(2) = \frac{p(2) - p(1)}{2}. \quad (2, 30)$$

Hasonlóan kapjuk a $q(1)$ 1-gyel és $q(2)$ 2-vel egyenlő alsó indexes tenzorra:

$$T_3 = -\frac{q(2) - q(1)}{2}. \quad (2, 31)$$

A p felső- és q alsóindexes vegyes tenzorra, melynek spurja 0, azt kapjuk (vö. (4,14)), hogy:

$$T_3 = \frac{1}{2} (m_2 - m_1) \equiv m_1 - \frac{m}{2}, \quad (2, 32)$$

ahol

$$\left. \begin{aligned} m_2 &= p(2) - q(2), \\ m_1 &= p(1) - q(1), \\ m &= m_1 + m_2. \end{aligned} \right\}$$

Azt mondhatjuk, hogy az $\frac{1}{2}(p+q) = T$ szám jellemzi az ábrázolást, az $m_2 - m_1$ szám pedig a 3. tengely körüli forgáscsoportot, azaz T e tengelyre való vetületének értékét.

3. §. Az unitér csoport

A harmadrendű komplex mátrixok unitér csoportja ugyanolyan módon épül fel, mint az SU_2 is. A harmadrendű mátrixokat ugyancsak U -val fogjuk jelölni, vagy, ha az indexeket ki kell írni, U_b^a -vel ($a, b = 1, 2, 3$). Az U mátrixokra:

$$UU^+ = 1, \quad (3, 1)$$

$$\text{Det } U = 1. \quad (3, 2)$$

A spinornak ebben a térben három komplex komponense van:

$$\psi^\alpha = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \end{pmatrix}. \quad (3, 3)$$

Ez kontravariáns spinor, felső indexes spinor, amely az U mátrix segítségével transzformálódik. Létezik még kovariáns spinor, alsó indexes spinor:

$$\Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3). \quad (3, 4)$$

Φ spinor U^+ mátrix segítségével transzformálódik. Nyilvánvaló, hogy (3,3) transzponált spinorja úgy transzformálódik, mint Φ .

A skalár szorzatot, amelyet az unitér transzformációk változatlanul hagynak, a következőképpen képezzük:

$$(\Phi, \Psi) = \Phi_\alpha \Psi^\alpha. \quad (3, 5)$$

Az SU_3 -ban az indexlehúzás művelete másképpen fest, mint az SU_2 -ben. Bevezetünk két antiszimmetrikus tenzort, amelyek a háromdimenziós térben háromindexesek:

$$\varepsilon^{abc} = \varepsilon_{abc} = \begin{cases} 1 & (a, b, c \text{ páros permutációra}) \\ -1 & (a, b, c \text{ páratlan permutációra}) \\ 0 & (\text{két index egyenlő permutációira}). \end{cases} \quad (3, 6)$$

Mivel $\text{Det } U = 1$, a tenzor komponenseinek nagyságát a csoporttranszformációk változtatlanul hagyják.

ε_{abc} tenzor hatását az SU_3 másodrendű tenzorának példáján szemléltethetjük.

A másodrendű tenzorok különféle típusúak lehetnek.

1. Ψ_a^b — egy felső és egy alsó indexes tenzor. Az ilyen tenzor spurja a csoport skalárja, és mert irreducibilis tenzor (hasonlóan, mint a kvadrupólmomentum-tenzor az elektrosztatikában), 0-val egyenlő:

$$\text{Sp } \Psi = \Psi_a^a = 0. \quad (3, 7)$$

2. Ψ^{ab} — két felső indexes tenzor. Bontsuk fel ezt a tenzort két tenzorra: szimmetrikusra (a -ra és b -re nézve) és antiszimmetrikusra:

$$\Psi^{ab} = \Psi^{[ab]} + \Psi^{(ab)}, \quad (3, 8)$$

$$\Psi^{[ab]} = \frac{1}{2} (\Psi^{ab} - \Psi^{ba}), \quad (3, 9)$$

$$\Psi^{(ab)} = \frac{1}{2} (\Psi^{ab} + \Psi^{ba}). \quad (3, 10)$$

A tenzor ilyen felbontása relativisztikusan invariáns unitér transzformáció. Most fogjuk ε_{abc} tenzort felhasználni. Megszorozva ezt (3,10)-zel, egy alsó indexes spinort kapunk:

$$\Psi_a = \varepsilon_{abc} \Psi^{[bc]}. \quad (3, 11)$$

Ily módon, a másodrendű antiszimmetrikus tenzor ekvivalens ebben az algebrában a spinorral. Megfordítva, a (3,9) szimmetrikus tenzort nem szabad redukálni. ε -nal való szorzata nullát ad. Ezért Ψ^{ab} -vel a szimmetrikus tenzort jelölhetjük, antiszimmetrikus tenzorokat egyáltalán nem fogunk használni.

3. Hasonló megfontolásokat ismételhetnénk meg a két alsó indexes Ψ_{ab} tenzorokra, ε^{abc} -t használva ebben az esetben. Végeredményben ezt a tenzort is szimmetrikusnak nevezhetjük.

Az összes elmondottakat megismételhetjük tetszőleges felső és alsó indexpárra. Ezért az irreducibilis tenzort általában két szám jellemzi — a felső és az alsó indexek száma. Emellett minden spurnak (egy tetszőleges alsó és felső index szerinti összegnek) nullának kell lennie. Az irreducibilis tenzorokat (és a nekik megfelelő ábrázolásokat) a $D(p, q)$ szimbólummal jelöljük, ahol p a felső indexek, q az alsó indexek száma. Ily módon a tenzorok következő osztályozásához jutunk az SU_3 -ban:

- $D(0, 0)$ — skalár (egy komponens),
- $D(1, 0)$ — kontravariáns spinor (három komponens),
- $D(0, 1)$ — kovariáns spinor (három komponens),
- $D(1, 1)$ — Ψ_a^b vegyes tenzor (nyolc komponens),
- $D(2, 0)$ — Ψ^{ab} kontravariáns tenzor (hat komponens),
- $D(0, 2)$ — Ψ_{ab} kovariáns tenzor (hat komponens) és í. t.

Idézzünk néhány képletet a komponensek számának kiszámítására. A k indexes szimmetrikus tenzornak (csak felső vagy csak alsó)

$$N(k, 0) = N(0, k) = \frac{(k+1)(k+2)}{2} \quad (3, 12)$$

számú komponense van. Az egyenlő számú felső és alsó indexes tenzornak

$$N(k, k) = (k+1)^3 \quad (3, 13)$$

számú komponense van. Az első formula egyszerűen azoknak a lehetőségeknek a száma, ahogyan három egész számból (egyes, kettes és hármas index) k darabot összerakhatunk. A másodikat a köbszámok természetes sorának ismert összegképletéből kapjuk:

$$\frac{1}{4} (k+1)^2 (k+2)^2 = \sum_{s=1}^{k+1} s^3.$$

Vegyük észre, hogy a bal oldalon (3, 12) jobb oldalának négyzete áll, vagy egy olyan tenzor komponenseinek teljes száma, amelynél a felső és alsó indexek száma ugyanannyi, a spurok pedig nullától különbözőek. Ezért utóbbi formulát úgy lehet interpretálni, mint az ilyen tenzor kevesebb indexű irreducibilisra való felbontásának képletét. (Az állítást könnyű teljes indukcióval igazolni.)

A p felső és q alsó indexes tenzor komponenseinek száma:

$$N(p, q) = \frac{1}{2} (p+1)(q+1)(p+q+2). \quad (3, 14)$$

Ezt a képletet egyszerre megkapjuk, ha észrevesszük, hogy a spuroknak nullává tévése előtt a komponensek száma (3, 12) alapján $\frac{1}{4} (p+1)(q+1)(p+2)(q+2)$. A spurok eltűnésének feltétele ekvivalens azzal, hogy egy $\frac{1}{4} pq(p+1)(q+1)$ komponensű $D(p-1, q-1)$ tenzor nullával egyenlő. E két szám különbsége meg is adja (3, 14) formulát.

Most megfogalmazhatjuk a vektorfelbontás szabályát. A forgáscsoport esetében ez a szabály azt eredményezi, hogy két, $2j_1+1$ és $2j_2+1$ komponensű tenzorból $2J+1$ komponensű tenzorok keletkeznek, ahol J végigfut minden egész (vagy feles) értéket (j_1-j_2) -től j_1+j_2 -ig. Az SU_3 -ban ez a szabály bonyolultabb, és legegyszerűbb, ha mindjárt alkalmazzuk.

Így, két Ψ^a és Ψ_b spinorból lehet Ψ skalárt és Ψ_b^a 8 komponensű tenzort alkotni. Szimbolikusan ezt így fogjuk jelölni:

$$D(1, 0) \times D(0, 1) = D(0, 0) + D(1, 1) \quad (3, 15)$$

vagy egyszerűen a komponensek száma szerint:

$$3 \times 3 = 1 + 8. \quad (3, 16)$$

Tekintsük két tenzor $\Psi_b^a \Phi_a^c$ szorzatát. Ahhoz, hogy irreducibilis részeket találjunk, így járunk el. Vesszük a kettős szummát, így skalárt kapunk:

$$X = \psi_b^a \varphi_a^b \text{ (egy komponens).} \quad (3, 17)$$

Csak egyszeresen szummázva kétféleképpen, és a spurt nullává téve, két tenzort kapunk:

$$X_d^a = \psi_d^a \varphi_d^b, \quad X_b^c = \psi_b^a \varphi_a^c \quad (\text{nyolc komponens}). \quad (3, 18)$$

Ha ε tenzor segítségével felemeljük az alsó indexeket, és azután szimmetrizálunk az összes felső indexek szerint, akkor harmadrendű felsőindexes tenzort kapunk:

$$X^{abc}. \quad (3, 19)$$

Hasonlóan építjük fel a harmadrendű alsóindexes tenzort:

$$X_{abc}. \quad (3, 20)$$

Marad még egy két felső és két alsó indexes negyedrendű tenzor, melynek spurjai nullák. Ennek a tenzornak $(2+1)^3 = 27$ komponense van:

$$X_{cd}^{ab} = \psi \{ {}_c^a \varphi_d^b \}. \quad (3, 21)$$

Ennek az eredménynek a formális felírása a következő:

$$\begin{aligned} D(1, 1) \times D(1, 1) = D(0, 0) + D(1, 1) + D(1, 1) + D(3, 0) + D(0, 3) + \\ + D(2, 2), \end{aligned} \quad (3, 22)$$

vagy:

$$8 \times 8 = 1 + 8 + 8 + 10 + \bar{10} + 27. \quad (3, 23)$$

A jelöléseknél figyelembe vettük azt a tényt, hogy a két oktett (másodrendű tenzor) ekvivalens, azaz ugyanolyan módon transzformálódik, a dekuplettek pedig (harmadrendű tenzorok) adjungált mátrixokkal transzformálódnak.

Idézzük még két dekuplett szorzatának képletét: (3, 13) képlet szerint rögtön írhatjuk ($k=2$):

$$10 \times \bar{10} = 1 + 8 + 27 + 64, \quad (3, 24)$$

vagy

$$D(3, 0) + D(0, 3) = D(0, 0) + D(1, 1) + D(2, 2) + D(3, 3). \quad (3, 25)$$

Levezetés nélkül leírunk még néhány képletet:

$$3 \times \bar{3} = 1 + 8,$$

$$D(1, 0) \times D(0, 1) = D(0, 0) + D(1, 1),$$

$$3 \times 3 = \bar{3} + 6,$$

$$D(1, 0) \times D(1, 0) = D(0, 1) + D(2, 0),$$

$$\bar{3} \times \bar{3} = 3 + \bar{6},$$

$$D(0, 1) \times D(0, 1) = D(1, 0) + D(0, 2),$$

$$6 \times 3 = 8 + 10,$$

$$D(2, 0) \times D(1, 0) = D(1, 1) + D(3, 0),$$

$$\bar{6} \times 3 = \bar{3} + 15,$$

$$D(0, 2) \times D(1, 0) = D(0, 1) + D(1, 2),$$

$$6 \times \bar{3} = 3 + \bar{15},$$

$$D(2, 0) \times D(0, 1) = D(1, 0) + D(2, 1),$$

$$\bar{6} \times 6 = 1 + 8 + 27,$$

$$D(0, 2) \times D(2, 0) = D(0, 0) + D(1, 1) + D(2, 2),$$

$$6 \times 6 = 6 + 15 + \bar{15}',$$

$$D(2, 0) \times D(2, 0) = D(0, 2) + D(2, 1) + D(4, 0),$$

$$\bar{6} \times \bar{6} = 6 + 15 + \bar{15}',$$

$$D(0, 2) \times D(0, 2) = D(2, 0) + D(1, 2) + D(0, 4)$$

és í. t.

Látjuk, hogy csak a legegyszerűbb ábrázolásokat lehet egy számmal leírni. Két tenzor, $D(2, 1)$ és $D(4, 0)$ egyaránt 15 komponensű, és megkülönböztetésül 15-öt és 15'-t írtunk.

A felbontási formulák együtthatóinak (Clebsch—Gordan-együtthatók) kiszámítása hosszadalmasabb. Mivel ezek nekünk nem szükségesek, itt nem fogunk róluk beszélni. (Ezek [B2]-ben megtalálhatók).

4. §. Az unitér spin

Hasonlóan ahhoz, hogy az SU_2 -ben az ábrázolást az izotóp spin nagysága jellemezte, az SU_3 algebrában is be lehet vezetni analóg karakterisztikát, az unitér spint, amelyet U -val fogunk jelölni. Az izotóp spin komponensei, melyeket 2,2-es mátrix alakjában írtunk fel:

$$T = \begin{pmatrix} T_3 & T_- \\ T_+ & -T_3 \end{pmatrix} \quad (4, 1)$$

a forgáscsoport generátorát alkotják. Ez azt jelenti, hogy a 3. tengely forgásmátrixa $\delta\varphi$ szög esetén

$$M = 1 + \frac{i}{2} \delta\varphi T_3 \quad (4, 2)$$

alakú. Az 1. és 2. tengely körüli elforgatásokra analóg képletek igazak, melyekben megfelelően a

$$T_1 = T_+ + T_-, \quad T_2 = \frac{1}{i} (T_+ - T_-) \quad (4, 3)$$

mátrixok lépnek fel. Az unitér spint 3·3-as mátrix segítségével vezetjük be:

$$U = \begin{pmatrix} Q & T_- & \vdots & L_- \\ T_+ & Y - Q & \vdots & K_- \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_+ & K_+ & \vdots & -Y \end{pmatrix}. \quad (4, 4)$$

A bal felső sarokban álló négy elem (4, 1) típusú mátrixot alkot, amelyben azonban a spur nem nulla (vagyis ez a mátrix az SU_2 -ben reducibilis). Ezt a mátrixot olyan mátrixösszeg alakjában írhatjuk fel, amelynek tagjai közül az egyiknek a spurja nulla:

$$\begin{pmatrix} Q & T_- \\ T_+ & Y-Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q-\frac{1}{2}Y & T_- \\ T_+ & \frac{1}{2}Y-Q \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Y & 0 \\ 0 & Y \end{pmatrix}. \quad (4, 5)$$

(4, 1)-gyel összehasonlítva azt látjuk, hogy

$$Q - \frac{1}{2}Y = T_3 \quad (4, 6)$$

vagy

$$Q = T_3 + \frac{1}{2}Y. \quad (4, 7)$$

Ha Q sajátértéke a töltést jelenti, akkor Y az $S+B$ (S a ritkaság, B a barionszám) hipertöltésnek megfelelő mátrix. A többi elemek (L_+ , L_- , K_+ , K_-) olyan mátrixok, amelyeknek ugyanolyan az alakja, mint a T_1 , T_2 és T_3 izotóp spinnek, csak a (2, 3) és (1, 3) alterekben hatnak. Minthogy az SU_3 csoport ábrázolásai megőrzik az $|X|^2 + |Y|^2 + |Z|^2$ kvadratikus alakot, azért minden kétdimenziós altérben létezik olyan alcsoport, amely megőrzi két abszolútérték-négyzet összegét, azaz, amely ekvivalens az SU_2 -vel. A (4, 4) mátrixok szerkezetéből látható, hogy különböző módon választhatók ki kommutáló mátrixrendszerek. Ha a (4, 5) mátrixokat választjuk ki alcsoport gyanánt, megkapjuk az Y , T^2 és T_3 mátrixrendszert. Ha azt a (2, 2)-es mátrixot választjuk alcsoportnak, amely (4,4) jobb alsó sarkában áll, akkor az

$$\begin{pmatrix} Y-Q & K_- \\ K_+ & -Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y-\frac{1}{2}Q & K_- \\ K_+ & -Y+\frac{1}{2}Q \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix} \quad (4, 8)$$

mátrixot kapjuk. Ekkor Q , K^2 és K_3 lesznek a kommutáló mátrixok, ahol

$$K_3 = Y - \frac{1}{2}Q. \quad (4, 9)$$

A kommutáló operátorok ilyen megválasztásánál a kvantumszámok egyike meg fogja határozni a részecske töltését. Ilyen ábrázolás alkalmas a gyenge és elektromágneses kölcsönhatások feladatának vizsgálatánál.

Térjünk vissza az Y , T^2 és T_3 kommutáló mátrixok rendszerének kiválasztásához. Tekintsünk egy tetszőleges, p felső és q alsó indexes tenzort. Jelöljük ezt, mint a hozzátartozó ábrázolást, $D(p, q)$ -val. A $p+q$ indexek mindegyike felveheti az 1, 2, 3 értéket. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\left. \begin{array}{l} p(1) \text{ az } 1\text{-gyel egyenlő felső indexek száma,} \\ p(2) \text{ a } 2\text{-vel egyenlő felső indexek száma,} \\ p(3) \text{ a } 3\text{-mal egyenlő felső indexek száma,} \\ q(1) \text{ az } 1\text{-gyel egyenlő alsó indexek száma,} \\ q(2) \text{ a } 2\text{-vel egyenlő alsó indexek száma,} \\ q(3) \text{ a } 3\text{-mal egyenlő alsó indexek száma.} \end{array} \right\} \quad (4, 10)$$

Y , T^2 és T_3 sajátértékei, valamint egy $D(p, q)$ tenzor komponensei között megfelelés létesül, ha Y -t egy valamilyen tenzor komponenseihez rendeljük. Éppen ebben a pontban történik annak az ábrázolásnak a kiválasztása, amely a reális részecskéket leírja. Gell-Mann és Ne'eman modelljében a $D(1, 1)$ oktettet vették

alapul. Adjuk ennek az oktettnak a következő hipertöltéseket:

$$\left. \begin{array}{ll} \Psi_b^a(a, b = 1, 2): & Y = 0, \\ \Psi_b^3(b = 1, 2): & Y = 1, \\ \Psi_3^a(a = 1, 2): & Y = -1, \\ \Psi_3^3: & Y = 0. \end{array} \right\} \quad (4, 11)$$

Emlékeztetünk arra, hogy a Ψ_b^a komponensek izotóp vektor és izotóp skalár keverékei ($a, b = 1, 2$):

$$\left. \begin{array}{ll} \Psi_b^a - \frac{1}{2} \delta_b^a \text{Sp } \Psi, & T\text{-vektor,} \\ \text{Sp } \Psi, & T\text{-skalár,} \\ \Psi_3^a, \Psi_3^3, & T\text{-spinor,} \\ T_3^3, & T\text{-skalár.} \end{array} \right\} \quad (4, 12)$$

A tenzoroktettek közül magasabbrendűeket fogunk összeállítani. Az oktettek szorzásakor olyan tenzorokat fogunk kapni, melyek felső és alsó indexeinek száma egyenlő, de spurjuk nem nulla. Jelöljük az ilyen tenzort $D'(k, k)$ -val, vesszővel jelölve azt a tényt, hogy $\text{Sp } D \neq 0$. A tenzorkomponensnek megfelelő hipertöltést a 3-as indexek száma fogja meghatározni, azaz $p(3)$ és $q(3)$. Mivel (4,11) szerint felső index Y értéke 1, és minden alsóé -1 , a $D'(k, k)$ tenzor komponensének hipertöltése: $p(3) - q(3)$. Innen látható, hogy a tenzor komponenseiben Y a $-k \leq Y \leq k$ határok között változik.

Most kiválasztjuk a tenzorból az irreducibilis összetevőket. Ehhez mindenekelőtt szimmetrizáljuk a tenzort a p felső és külön a q alsó indexek szerint. A $D(k, k)$ irreducibilis tenzort kapjuk, ahol Y ugyanolyan $-k \leq Y \leq k$ határok között változik.

Ha p vagy $q \geq 2$, akkor ε_{abc} segítségével $D'(k, k)$ két indexét lehúzzhatjuk, a két felső indexet egy alsó indexszé változtatva. Pontosan ugyanígy ε^{abc} tenzor segítségével két alsó indexet felemelhetünk, egy felsővé változtatva ezeket. Ily módon a $D'(k, k)$ tenzort átalakíthatjuk $D'(k-2, k+1)$ vagy $D'(k+1, k-2)$ tenzorra. Ezután a kapott tenzorokat megfelelően szimmetrizálnunk kell $D(k-2, k+1)$ vagy $D(k+1, k-2)$ tenzorokká.

ε tenzorok antiszimmetrikusak, így, ha $D(p, q)$ tenzor minden p indexe 3-mal egyenlő, akkor ε_{abc} -vel való szorzata nullát ad. Pontosan ugyanígy, ha a $D(p, q)$ tenzor összes alsó indexe 3-mal egyenlő, akkor ε^{abc} -vel való szorzata nulla. Innen arra lehet következtetni, hogy a $D(k-2, k+1)$ tenzor egy Y értékkel kevesebbet tartalmaz, mint a $D(k, k)$ kiindulási tenzor: nincs olyan komponense, ahol $Y = k$. Így a $D(k-2, k+1)$ tenzorkomponensekben Y a $-k \leq Y \leq k-1$ határok között mozog. Arra is következtethetünk, hogy a $D'(k+1, k-2)$ tenzor komponenseire $-k+1 \leq Y \leq k$. Ha $2s$ indexet húzunk le, s darab alsóvá változtatva azokat, akkor — analóg módon — azt találjuk, hogy az új $D(k-2s, k+s)$ tenzor hipertöltése a $-k \leq Y \leq k-s$ határok között változik. Pontosan ugyanígy a $D(k+s, k-2s)$ tenzorra: $-k+s \leq Y \leq k$.

Innen tetszőleges $D(p, q)$ tenzorra azt találjuk — ha $k = \frac{p+2q}{2}$ és $s = -\frac{p-q}{3}$ ($p = k-2s, q = k+s$), hogy a hipertöltés a

$$-\frac{p+2q}{3} \leq Y \leq \frac{2p+q}{3} \quad (4, 13)$$

határok között változik.

A $D(p, q)$ tenzor komponenseinek hipertöltését a 3-as indexek száma határozza meg. Tegyük fel:

$$Y = p(3) - q(3) + a, \quad (4, 14)$$

ahol a állandó. Ezt az állandót megkapjuk, ha észrevesszük, hogy $p(3) = p$ és $q(3) = 0$ esetén Y értéke maximális: $\frac{1}{3}(2p+q)$. Innen $a = -\frac{1}{3}(p-q)$.

$$p - q = m.$$

A $p(3) - q(3) = m_3$, $p - q = m$ jelölésekkel azt kapjuk, hogy

$$Y = m_3 - \frac{1}{3}m. \quad (4, 14')$$

Hasonlóan kaphatjuk meg a töltés kifejezését:

$$Q = -m_1 + \frac{1}{3}m, \quad (4, 15)$$

ahol $m_1 = p(1) - q(1)$. Ezt a (4, 4) determinánsának az $(Y \rightleftharpoons -Q$ és $1 \rightleftharpoons 2)$ cserére vonatkozó szimmetriája határozza meg. Ha még hozzátesszük, hogy $Y - Q = -m_2 + \frac{1}{3}m$, akkor észre lehet venni, hogy az m_1, m_2, m_3 számok a „mágneses” kvantumszámok szerepét játsszák. A (4, 4) főátlójában álló három operátor sajátértékösszegének nullává tevésére bevezetjük az $\frac{1}{3}m = \frac{1}{3}(m_1 + m_2 + m_3)$ tagot. Ez is az algebrai oka annak, hogy az $\frac{1}{3}$ szorzó megjelenik a képletekben (vö. (2,31)).

A (4,13) képletből kifejezést kaphatunk az unitér multipllett „szélességére” vonatkozóan:

$$Y_{\max} - Y_{\min} = p + q. \quad (4, 16)$$

Az izotóp spin analógiájára az összes indexek számának felét elnevezhetjük U unitér spinnek,

$$U = \frac{p+q}{2}, \quad (4, 17)$$

mivel Y különböző értékeinek száma $2U+1$. A „multipllett súlypontjára” ezt kapjuk:

$$Y_{\max} + Y_{\min} = \frac{p-q}{3}. \quad (4, 18)$$

A (4, 14)–(4, 17) képletek teljesen leírják a multipllett hipertöltés-szerkezetét.

Ezek a képletek Y -ra egész értékeket adnak, de csak olyan tenzorok esetében, amelyekre $(p-q) = 3n$, ahol n pozitív egész szám. Az a séma, amelyet a $D(k, k)$ tenzorból a $D(k+s, k-2s)$ tenzorok alkotására használunk, tehát megfelelő tenzorokat ad. Olyan tenzorokat, melyekre $(p-q) \neq 3n$, nem kaphatunk ilyen módon. Ez emlékeztet a forgáscsoport esetére, ahol vektorok segítségével csak olyan tenzorokat lehet felépíteni, melyeknek izotóp spinje egész értékű; a feles izotóp spinű spino-

rokat külön kell bevezetni. Az SU_3 csoportban szintén felmerülnek nem egész értékű hipertöltéssel rendelkező spinorok. Ezek hipertöltése $1/3$ többszöröse. Ha megtartjuk a kapott szabályokat olyan tenzorokra is, amelyekre $(p-q) \neq 3n$, azt kapjuk pl., hogy az egy felső indexes $D(1, 0)$ spinor komponenseihez így rendelhető hozzá Y :

$$\begin{aligned} \Psi^1: \quad p &= 0, & Y &= -\frac{1}{3}, \\ \Psi^2: \quad p &= 0, \frac{1}{3}(p-q) = \frac{1}{3}, & Y &= -\frac{1}{3}, \\ \Psi^3: \quad p &= 1, & Y &= \frac{2}{3}. \end{aligned} \quad (4, 19)$$

Ψ_a tenzor komponenseire hasonlóan: $Y = \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -\frac{2}{3}$. Így az SU_3 -ban megjelennek a hipertöltés tört értékei. Az ilyen elképzeléseknek megfelelő részecskék (kvarkok, Gell-Mann terminológiája szerint) megfigyelésére végzett kísérletek mindeddig kudarcot vallottak (I. Bevezetés).

Most folytathatjuk a tenzorkomponensek osztályozását, és rátérhetünk az izotóp spin és vetületeinek értékeire. Ha egy $D(p, q)$ tenzorban néhány hármas index is van, akkor a többi, 1-es és 2-es indexek az izotóp tér egy $p(1)+p(2) = p(1, 2)$ felső indexes és $q(1)+q(2) = q(1, 2)$ alsó indexes tenzorát alkotják. Az SU_2 ilyen tenzorának irreducibilis tenzorokra való felbontása a szokásos összegzéses módszerrel történik — egy felső és egy alsó index szerint az 1, 2 értékekre összegzünk. Mivel a $p(1, 2)$ darab, 1 és 2 értékeket felvevő indexes tenzornak $p(1, 2)+1$ komponense van, az ilyen tenzor izotóp spinje:

$$T_p = \frac{1}{2}p(1, 2). \quad (4, 20)$$

Hasonlóan a $q(1, 2)$ alsó indexes tenzorra:

$$T_q = \frac{1}{2}q(1, 2). \quad (4, 21)$$

A $p(1, 2)$ felső és $q(1, 2)$ alsó indexes tenzor olyan irreducibilis tenzorokra esik szét, melyek spinje:

$$T_p + T_q, T_p + T_q - 1, \dots, |T_p - T_q|. \quad (4, 22)$$

Végül, egy izotóp spin-komponens nagyságát a következő képlettel határozzuk meg (2, 32):

$$T_3 = \frac{1}{2}(m_2 - m_1) = \frac{1}{2}[p(2) - q(2) - p(1) + q(1)], \quad (4, 23)$$

amely megfelel a $T_3 = Q - \frac{1}{2}Y$ definíciónak és a (4, 14) és (4, 15) formuláknak.

Így az unitér tenzorok komponenseinek a következő rendszerezéséhez jutunk. Az irreducibilis unitér tenzor komponenseit öt kvantumszám jellemzi:

1. a felső indexek q száma,
 2. az alsó indexek a száma,
 3. a T izotóp spin,
 4. az Y hipertöltés ((4, 14) képlet),
 5. a T_3 izotóp spin-vetület ((4, 23) képlet).
- p és q helyett bevezethetjük:
- 1a) az $U = \frac{1}{2}(p+q)$ unitér spint ((4, 17) képlet),
 - 2a) a multiplett $C = \frac{1}{3}(p-q)$ „súlypontját” ((4, 18) képlet).

C , Y és T_3 helyett bevezethetjük az

$$m_s = p(s) - q(s), \quad s = 1, 2, 3 \quad (4, 24)$$

kvantumszámokat. Akkor

$$\left. \begin{aligned} C &= \frac{1}{3}(m_1 + m_2 + m_3), \\ T_3 &= \frac{1}{2}(m_2 - m_1), \\ Y &= \frac{1}{3}(2m_3 - m_1 - m_2). \end{aligned} \right\} \quad (4, 25)$$

Az m_1, m_2, m_3 számok U -val és T -vel együtt az unitér multiplettet leíró öt kvantumszám választásának egy másik lehetőségét képezik.

Feljegyezzünk még egy hasznos képletet az egyfajta indexes — $D(p, 0)$ és $D(0, q)$ típusú — tenzorok számára. A $D(p, 0)$ tenzor komponenseinek hipertöltése (4,14) szerint $Y = p(3) - p/3$. Az ilyen Y értékkel rendelkező komponens izotóp spinje nyilván $\frac{1}{2}(p - p(3))$, mivel $p - p(3)$ azoknak az indexeknek száma, amelyek az 1 vagy 2 értéket veszik fel. Innen látjuk, hogy a $D(p, 0)$ típusú tenzorokra fennáll az

$$Y + 2T = \frac{2}{3}p \quad (4, 26)$$

egyenlet, és analóg módon a $D(0, q)$ tenzorokra

$$-Y + 2T = \frac{2}{3}q. \quad (4, 27)$$

Így az ilyen tenzorok esetében T -t Y meghatározza. Vizsgáljunk meg most néhány multiplettet.

I. TÁBLÁZAT

SU_3 multiplettek

I. $D(1,1)$, $U=1$ oktett

	Y	T
$\Psi_b^a(a, b = 1, 2)$	0	1 és 0
$\Psi_b^3(b = 1, 2)$	1	$\frac{1}{2}$
$\Psi_3^a(a = 1, 2)$	-1	$\frac{1}{2}$

II. $D(0,3)$ kovariáns deкупlett $U=\frac{3}{2}$

	Y	T
$\Psi_{abc}(a, b, c = 1, 2)$	1	$\frac{3}{2}$
$\Psi_{ab3}(a, b = 1, 2)$	0	1
$\Psi_{a33}(a = 1, 2)$	-1	$\frac{1}{2}$
Ψ_{333}	-2	0

$\Psi_3^3 = -\Psi_1' - \Psi_2^2$ és ezért nincs benne a táblázatban.

III. $D(3,0)$, $U=\frac{3}{2}$ kovariáns deкупlett IV. $D(2,2)$, $U=2$ 27-plet

	Y	T
$\Psi^{abc}(a, b, c = 1, 2)$	-1	$\frac{3}{2}$
$\Psi^{ab3}(a, b = 1, 2)$	0	1
$\Psi^{a33}(a = 1, 2)$	1	$\frac{1}{2}$
Ψ_{333}	2	0

	Y	T
$\Psi_{cd}^{33}(c, d = 1, 2)$	2	1
$\Psi_{cd}^{3b}(b, c, d = 1, 2)$	1	$\frac{3}{2}$ és $\frac{1}{2}$
$\Psi_{cd}^{ab}(a, b, c, d = 1, 2)$	0	2, 1 és 0
$\Psi_{3d}^{ab}(a, b, d = 1, 2)$	-1	$\frac{3}{2}$ és $\frac{1}{2}$
$\Psi_{33}^{ab}(a, b = 1, 2)$	-2	1

5. §. Mezonok és barionok

Helyettesítsük most a reális részecskéket unitér tenzorokkal. A barionoktett a nukleonból és a Λ , Σ és Ξ hiperonokból áll. Az előző paragrafus szerint ezeket mátrixalakban lehet leírni (felső index — sor, alsó — oszlop):

$$(B_b^a) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \Sigma^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \Lambda & \Sigma^- & \Xi^- \\ \Sigma^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}} \Sigma^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \Lambda & \Xi^0 \\ -p & n & -\sqrt{\frac{2}{3}} \Lambda \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Az együtthatókat a mátrixban úgy választottuk, hogy a

$$\text{Sp } \bar{B}B = \bar{p}p + \bar{n}n + \bar{\Sigma}^+ \Sigma^+ + \bar{\Sigma}^0 \Sigma^0 + \bar{\Sigma}^- \Sigma^- + \bar{\Xi}^0 \Xi^0 + \bar{\Xi}^- \Xi^- \quad (5.2)$$

kifejezésben az összes együtthatók 1-ek legyenek, és hogy $\text{Sp } \Psi = 0$ legyen.

Az (5, 1) mátrixban a protonnak mínusz előjele van. Ez a (2, 22) képlet kovariáns spinorkomponens-definíciójának felel meg. Az irodalomban használatos olyan oktettdefinió, amely (5, 1)-től a sorok és oszlopok felcserélésében és Ξ^0 előtt egy negatív előjelben különbözik.

A mezonok (és rezonanciák) két ismert oktettet képeznek. A pszeudoskalár mezonoktett π^- , η^- és K -mezonokból áll. E mezonok mátrixa (5, 1)-hez hasonló:

$$(P_b^a) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \pi^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \eta & \pi^- & K^- \\ \pi^0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \pi^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \eta & \bar{K}^0 \\ -K^+ & K^0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} \eta \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

A ϱ , K^* ($K\pi$ rezonancia) és ϕ mezonok vektoroktettje a következő mátrixot alkotja:

$$(V_b^a) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \varrho^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \phi & \varrho^- & K^{*-} \\ \varrho^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}} \varrho^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \phi & \bar{K}^{*0} \\ -K^{*+} & K^{*0} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \phi \end{pmatrix}.$$

A mezonoktettek abban különböznek a barionoktettől, hogy ezekben a részecskék antirészecskéjükkel együtt szerepelnek. Ezeket az oktetteket a

$$P^+ = P, \quad V^+ = V \quad (5.4)$$

hermitikus mátrixok írják le.

Az (5, 1) oktetten kívül ismert még egy barion-dekuplett, amelynek élén a híres Ω^- -hiperon áll. Ezt a dekuplettet három alsó indexes Ψ_{abc} tenzor írja le, amely 10 különböző komponensből áll. Ezeket a komponenseket táblázatban tüntethetjük fel. A komponens száma után (alsó indexek) megjegyezzük azoknak a tenzorkomponenseknek a számát, amelyeket indexcserével kaphatunk. Ez a szám határozza meg az utolsó oszlopban levő együttthatókat.

II. TÁBLÁZAT

A bariondekuplett komponensei

Szám	Komponens	Y	T	T_3	Rezonancia
1	333 (1)	-2	0	0	Ω^-
2	331 (3)	-1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \Xi^{*-}$
3	332 (3)			$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \Xi^{*0}$
4	311 (3)	0	1	-1	$\frac{1}{\sqrt{3}} \Sigma^{*-}$
5	312 (6)			0	$\frac{1}{\sqrt{6}} \Sigma^{*0}$
6	322 (3)			1	$\frac{1}{\sqrt{3}} \Sigma^{*+}$
7	111 (1)	1	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	Δ^-
8	112 (3)			$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \Delta^0$
9	122 (3)			$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \Delta^+$
10	222 (1)			$\frac{3}{2}$	Δ^{++}

A normálást úgy választottuk, hogy a $\bar{\Psi}\Psi$ kvadratikus kifejezésben minden részecske egyformán egyes együttthatóval lépjen fel.

6. §. A multiplettek tömegfelhasadása

A részecskemultiplettek teljesen elfajultak, vagyis minden komponensnek szigorúan ugyanakkora tömege lenne, ha a részecskék semmivel sem hatnának kölcsön. A virtuális részecskékkal (a rövidség kedvéért „vákuumról” fogunk beszélni) való erős kölcsönhatás előidézi a multiplettek felhasadását. Ezt a felhasadást olyan módszerrel lehet leírni, amely egészen hasonló ahhoz, mint amilyent a kvantummechanikában az atomi szintek a Zeeman-felhasadásának leírására használnak.

A multipllett vákuummal való kölcsönhatását úgy fogjuk tekinteni, mintha néhány olyan effektív állandó tér írná le, amely tulajdonságai alapján $D(1, 1)$ vegyes tenzor.⁵ Jelöljük a teret $H \equiv H_b^a$ -vel (l. 30. l). A felhasadás pontosabb leírására bevezethetünk magasabb rendű H_{cd}^{ab} , H_{def}^{abc} stb. „tereket” is, mégis, mint azt alább részletezni fogjuk, a kísérlettel való összehasonlítás azt mutatja, hogy a megfelelő kölcsönhatási tagok kicsinyek. A rendszer szabad (perturbálatlan) Lagrange-függvényében a tömeg

$$\left. \begin{array}{l} \text{barionok esetében az } m \text{ Sp} \bar{\psi} \psi \\ \text{mezonok esetében az } m^2 \text{ Sp} \psi \psi, \end{array} \right\} \quad (6, 1)$$

kombinációkban fordul elő. A perturbáció (a „térrel” való kölcsönhatás) egy összeadandóval járul hozzá a barionok tömegéhez és a mezonok tömegének négyzetéhez.⁶ Ennek az adaléknak a kiszámításához keressünk hasonló multipól-rendszereket. A Ψ függvényből és $\bar{\Psi}$ konjugáltjából a

$$\left. \begin{array}{l} \text{Sp } \bar{\Psi} \Psi \quad \quad \quad 0\text{-pólust} \\ \bar{\Psi}_c^a \Psi_b^c \pm \bar{\Psi}_b^c \Psi_c^a \quad 8\text{-pólust} \end{array} \right\} \quad (6, 2)$$

lehet összeállítani.⁷ A többi komponensek egy 27-pólust alkotnak.

A 0-pólus (skalár) középértéke adja a perturbálatlan tömeget, a 8-pólus vezet a H_b^a -vel arányos perturbációhoz, a 27-pól a H_{cd}^{ab} -vel arányos perturbációhoz.

Ha Ψ hermitikus (bozonok), akkor a két 8-pólus megegyezik, mivel hermitikus mátrixokra $\bar{\Psi} \Psi = \bar{\Psi} \Psi$; ezért a barionoktett komponenseiből két 8-pólust lehet készíteni, a mezonoktett komponenseiből pedig csak egy 8-pólust.

Hasonlóan a deкупlett komponenseiből ezeket állíthatjuk össze:

$$\left. \begin{array}{l} 0\text{-pólus: } (\bar{\Psi}, \Psi), \\ 8\text{-pólus: } \bar{\Psi}_{abc} \Psi_{abf}, \\ 27\text{-pólus: } \bar{\Psi}_{abc} \Psi_{aef}, \\ 64\text{-pólus: } \bar{\Psi}_{abc} \Psi_{def} \end{array} \right\} \quad (6, 3)$$

(minden spur eltűnik). A képletek levezetésekor a fentebb mondottaknak megfelelően csak a 8-pólussal való kölcsönhatást fogjuk figyelembe venni.

Kezdjük a barionoktettel. A H térrel való kölcsönhatást

$$C_1 \text{ Sp } H \bar{\Psi} \Psi \quad \text{és} \quad C_2 \text{ Sp } H \bar{\Psi} \Psi \quad (6, 4)$$

alakú tagok (C_1 és C_2 állandók) írják le. Magától értetődő, hogy az első közelítésben az izotóp multipllett belsejében a tömegkülönbséget elhanyagoljuk, úgy tekintve, hogy a T továbbra is jó kvantumszám. A cikk végén az izotóp multipllett felhasadásának eredményét is ugyanígy fogjuk vizsgálni.

Válasszuk H -t úgy, hogy H_3^3 legyen a nullától különböző komponens. Akkor a térrel való (6,4) kölcsönhatás a

$$\Delta M = a \Psi_r^3 \Psi_r^3 + b \bar{\Psi}_3^r \Psi_r^3 \quad (6, 5)$$

⁵ Hogy vizsgálhassuk ebben a sémában a reakciókat és a bomlásokat, szükséges, hogy a tenzorkomponensek energiafüggését figyelembe vegyük.

⁶ Mivel a felhasadás a barionok esetében aránylag kicsiny, itt is vehetjük a tömegek négyzetét.

⁷ A rövidség kedvéért a k komponensű multipólt k -pólusnak nevezzük.

alakban írható fel. Az a és b állandók határozzák meg a kölcsönhatás intenzitását a két 8-pólussal. Ha most (5, 1)-hez fordulunk, akkor a barionok tömegére ezeket az értékeket kapjuk (ahol m_0 a perturbálatlan oktettt tömege):

$$\left. \begin{aligned} m(\Xi) &= m_0 + a, \\ m(N) &= m_0 + b, \\ m(\Sigma) &= m_0, \\ m(\Lambda) &= m_0 + \frac{2}{3}(a+b) \end{aligned} \right\}. \quad (6, 6)$$

Ebből következik Gell-Mann—Okubo képlete:

$$\frac{1}{2}[m(\Xi) + m(N)] = \frac{1}{4}[m(\Sigma) + 3m(\Lambda)]. \quad (6, 7)$$

Ha Σ tömegét vesszük alapul⁸, akkor a barionok ismert tömegéből összeállíthatjuk a III. táblázatot (a Ξ és N esetében a két komponens össztömegének felét vesszük).

III. TÁBLÁZAT

A barionoktett intervallumai

	$m - m(\Sigma^0)$ MeV
Ξ	125
N	-253
Σ^0	0
Λ	77
$\frac{\Xi + N}{2}$	-64
$\frac{3}{4}\Lambda$	-58

A (6, 6) képleteket más alakba lehet önteni. A (4, 5) képletből megkapható, hogy a szimmetriának SU_2 -vé való lecsökkenése után a csoportinvariánsok $2 \cdot 2$ -es mátrixok spurjai és determinánsai lesznek. A determináns:

$$QY - Q^2 + \frac{1}{2}(T_+ T_- + T_- T_+).$$

De (4, 6) képletből:

$$Q^2 - QY = T_3^2 - \frac{1}{4}Y^2.$$

Innen következik, hogy a felhasadt multiplettet jellemző kvantumszámok

$$Y \text{ és } T(T+1) - \frac{1}{4}Y^2 \quad (6, 8)$$

lesznek. Ezért a barion tömege az elsőrendű tag pontosságáig:

$$M = M_0 + M_1 Y + M_2 [T(T+1) - \frac{1}{4}Y^2], \quad (6, 9)$$

⁸ Ha a barionok és a Σ^0 tömegének különbségét a barionok szimbólumával jelöljük, (6,7) ilyen alakban írható fel: $\Xi + N = \frac{3}{2}\Lambda$.

ahol M_0 , M_1 és M_2 új állandók. Ilyen alakban a képletet tetszőleges barionmultiplettre alkalmazni lehet. a , b és M_0 , M_1 és M_2 között a kapcsolatot könnyű megállapítani.

Felmerül a magától értetődő kérdés, hogy jogos-e az elsőrendű perturbációszámítás képleteinek felhasználása. Világos, hogy a tömegfelhasadás és a perturbálatlan multiplett tömegének aránya nem lehet a perturbáció kicsinységének mértéke, más támpontot kell keresni, de szigorúan véve ilyen egyáltalán nem létezik.

Elképzelhető, hogy a barionmultiplettnak egyáltalán nincs magasabbrendű multipólus-járuléka, hasonlóan ahhoz, hogy a neutronnak nincs kvadrupólnál magasabb elektromos momentuma. Ez azt jelenti, hogy nincs más, alacsonyabb szimmetriájú barionmultiplett, amely alacsonyabb szimmetriájú perturbációt hozna be.

De ha a H_{cd}^{ab} teret (H_{33}^{33} komponenssel) figyelembe vesszük a tömegformulában, akkor (6, 5)-höz a

$$c\bar{\Psi}_3^3\Psi_3^3 \quad (6, 10)$$

járulék adódik hozzá⁹, amely a (6, 6) képletekben Λ tömegét közelebb hozza a $2c/3$ értékhez. Világos, hogy ez az állandó fogja a (6, 7) képlettől való eltérést meghatározni, úgyhogy

$$c = -\frac{2}{3}[2m(\Xi) + 2m(N) - m(\Sigma) - 3m(\Lambda)]. \quad (6, 11)$$

Innen következik, hogy $c \approx 36$ MeV, ami meg is határozza a H_{33}^{33} és a 27-pólus közötti kapcsolat intenzitását.

Térjünk most át a dekuplettre. Itt a tömegkorrekció a következő:

$$\Delta M = d\bar{\Psi}^{ab3}\Psi_{ab3}. \quad (6, 12)$$

A II. táblázat segítségével a következő tömegértékeket kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} m(\Omega) &= m_0 + d, \\ m(\Xi^*) &= m_0 + \frac{2}{3}d, \\ m(\Sigma^*) &= m_0 + \frac{1}{3}d, \\ m(\Lambda) &= m_0. \end{aligned} \right\} \quad (6, 13)$$

Így a dekuplett szintjei ekvidisztans módon $\frac{1}{3}d$ távolságban helyezkednek el. A kísérletek alapján ez a távolság 145 MeV, tehát

$$d = 435 \text{ MeV}. \quad (6, 14)$$

Az ekvidisztanciát megkaphatjuk a (6, 9) képletből, ha figyelembe vesszük, hogy dekuplettre (4, 20) szerint

$$T = \frac{1}{2}Y + 1, \quad (6, 15)$$

ahonnan

$$M = (M_0 + 2M_2) + (M_1 + \frac{3}{2}M_2)Y, \quad (6, 16)$$

ahol, általában véve, az állandók nem egyeznek meg az oktett állandóival.

⁹ A 27-pólus komponensei: $\Psi_{cd}^{ab} = \bar{\Psi}_c^a\bar{\Psi}_d^b - \frac{1}{3}\bar{\Psi}_c^e\bar{\Psi}_e^b\delta_d^a - \frac{1}{3}\bar{\Psi}_e^a\bar{\Psi}_d^e\delta_c^b + \bar{\Psi}_e^e\bar{\Psi}_e^a\delta_d^b\delta_c^b$. A 27-pólusnak H_{33}^{33} -mal való szorzata eredményezi a többi tömeg hozzáadódását. Ez a hozzáadódás azonban az állandók keveredéséhez vezet, mivel a leírt képletben csak az első tagot lehet külön vizsgálni.

A mezonoktett formuláját megkapjuk a barionoktettéből, ha ebbe $a=b=c$ -t helyettesítünk (vagy a (6, 9) képletbe $M_1=0$ -t), és figyelembe vesszük, hogy ezek a képletek nem a tömegekre, hanem azok négyzetére érvényesek. A pszeudoskalár mezonoktetre, (6, 6)-hoz hasonlóan:

$$\Delta m^2 = e \operatorname{Sp}(H\bar{P}P), \quad (6, 17)$$

$$\left. \begin{aligned} m^2(K) &= m_0^2 + e, \\ m^2(\pi) &= m_0^2, \\ m^2(\eta) &= m_0^2 + \frac{4}{3}e. \end{aligned} \right\} \quad (6, 18)$$

Persze ebben a formulában m_0 nem ugyanaz, mint a barionok képletében.

(6, 18)-ból hasonló összefüggést kapunk, mint (6, 7)-ből:

$$m^2(K) = \frac{1}{4}[m^2(\pi) + 3m^2(\eta)]. \quad (6, 19)$$

A pszeudoskalár mezonok tömegének négyzetét a IV. táblázatban foglaltuk össze.

IV. TÁBLÁZAT

*A pszeudoskalár mezonok tömegének négyzete
(különbségek)*

	(tömeg) ² - $m^2(\pi)$, (GeV) ²
η	0,28
K	0,22
π	0

V. TÁBLÁZAT

*A vektormezonok tömegének négyzete
(különbségek)*

	(tömeg) ² - $m^2(\varrho)$, (GeV) ²
φ	0,46
K^*	0,21
ω	0,03
ϱ	0

A tömegnégyzetek különbségére fennálló

$$m^2(K) = \frac{3}{4} m^2(\eta) \quad (6, 20)$$

reláció elég jól teljesül.

A vektormezonok esetében az egyezés már jelentékenyen rosszabb. Ezt — úgy látszik — azzal lehet magyarázni, hogy az oktett belsejében még egy vektormezon helyezkedik el: ω ($Y=T=0$). Ez a mezon, magától értetődően, megzavarja az oktettet (V. táblázat).

Annak a zavarnak a leírása, amelyet az ω -mezon a vektoroktettben okoz, általában mind az SU_3 csoport, mind a fentebb leírt szimmetriasértés keretein túlhalad. Az, hogy a természetben két közeleső tömegű és egyforma kvantumszámokkal rendelkező mezon figyelhető meg (ω -mezon és ϱ -mezon), úgy látszik, arra utal, hogy létezik egy magasabb szimmetria, amelynek megsértését demonstrálja az ω és φ -mezon felhasadás, hasonlóan ahhoz, ahogyan az SU_3 szimmetria megsértése a φ és ϱ_0 -mezonok tömegfelhasadásához vezet. Azonban a csoport egyszerű kiterjesztése pl. SU_4 -gyé a multipléttkomponensek számának megnövekedését eredményezi, úgyhogy e rejtély megoldásának furdangosabbnak kell lennie.¹⁰ Meg kell

¹⁰ Hasonló szituációra példa a forgáscsoport kiterjesztése Lorentz-csoporttá. Mint ismeretes, ilyen kiterjesztéskor adott spinű állapotok kicserélődnek kisebb spinű állapotokkal.

említenünk a másik rejtélyt is, amelyet a mezonoktettek nyújtanak. Az idézett adatokból látható, hogy a két oktettben az első távolságok megegyeznek:

$$m^2(K) - m^2(\pi) = m^2(K^2) - m^2(\varrho) \quad (6, 21)$$

Világos, hogy az ilyen reláció nem következhet az SU_3 szimmetriából. Itt arról van szó, hogy a különböző mezonoktetteknek a H térrel való kapcsolata ugyanolyan (univerzális a kölcsönhatás). Ha az ilyen összeesés nem véletlen, akkor ennek magyarázata is csak magasabb szimmetria megsértésével lehet kapcsolatos. Ráműtathatunk még arra, hogy ha a φ és ω -mezonok tömegének négyzetéből kivonjuk ezek összegének felét, akkor az így kapott séma gyakorlatilag megegyezik a pszeudskalár sémával. Forduljunk most a felhasadás leírásának *Schwinger* által mutatott módszeréhez.¹¹

Ténylegesen feltesszük, hogy egy kilencedik mezon kerül az oktettbe, amelynek spurja ez esetben nullától különböző. Az ilyen oktett mátrixa:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \varrho^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \varphi + \frac{1}{\sqrt{3}} \omega & \varrho^- & K^{*-} \\ \varrho^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}} \varrho^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \varphi + \frac{1}{\sqrt{3}} \omega & \bar{K}^0 \\ -K^+ & K^0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi + \frac{1}{\sqrt{3}} \omega \end{pmatrix}. \quad (6, 22)$$

A szimmetriát megsértő kölcsönhatás képviselésében két összeadandót veszünk: egy szokásos típusút, $Sp H\bar{V}V$, és egy másik, egyszerűbbet, amely felhasítja ω és ϱ tömegét. Ezt a második összeadandót egyszerűen ilyen alakúnak vesszük: $h\bar{\omega}\omega$. Ez a kölcsönhatás most összekeveri a φ és ω -mezonokat, mivel a (6, 22) jobb alsó sarkában álló elemek négyzetét tartalmazza. Így tehát tekintsük a

$$\Delta M = g\bar{V}_\alpha^3 V_\alpha^3 + h\bar{\omega}\omega \quad (6, 23)$$

kölcsönhatást. A (6, 23) kölcsönhatás a következő mezöntömegeket hozza létre (m_0^2 új állandó, amely a (6, 18)-ban szereplő állandóval nincs összefüggésben):

$$\left. \begin{aligned} m^2(K) &= m_0^2 + g, \\ m^2(\varrho) &= m_0^2, \\ m^2(\varphi) &= m_0^2 + \frac{4}{3} g, \\ m^2(\omega) &= m_0^2 + \frac{2}{3} g + h, \\ m^2(\bar{\omega}\varphi) &= \frac{2\sqrt{2}}{3} g; \end{aligned} \right\} \quad (6, 24)$$

$m^2(\bar{\omega}\varphi)$ jelenti a kiindulásul vett φ -t és ω -t összekeverő mátrixelemet. Mint a Zeeman-

¹¹ ω és φ keveredését *Sakurai* vizsgálta dolgozatában [F4].

effektus elméletében is, a valódi szinteket, a valódi φ és ω tömegét sajátértékegyenletekkel kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} \left(m_0^2 + \frac{4}{3}g\right)m^2(\varphi) + \frac{2\sqrt{2}}{3}gm^2(\omega) &= \lambda m^2(\varphi), \\ \frac{2\sqrt{2}}{3}gm^2(\varphi) + \left(m_0^2 + \frac{2}{3}g + h\right)m^2(\omega) &= \lambda m^2(\omega). \end{aligned} \right\} \quad (6, 25)$$

Az egyenlet determinánsa:

$$\begin{vmatrix} m_0^2 + \frac{4}{3}g & \frac{2\sqrt{2}}{3}g \\ \frac{2\sqrt{2}}{3}g & m_0^2 + \frac{2}{3}g + h \end{vmatrix}. \quad (6, 26)$$

Mint ismeretes, a sajátérték-egyenletek összege (6,26) spurját adja:

$$\begin{aligned} m^2(\varphi) + m^2(\omega) &= 2m_0^2 + 2g + h. \\ h &= m^2(\varphi) + m^2(\omega) - 2m^2(K^*). \end{aligned}$$

A (6, 25) sajátégyenletek szorzata (6, 26) determinánst adja. A tömegre vonatkozó képletek helyett intervallumokra vonatkozó képletet kapunk (ϱ tömegét véve egységnek). Ez azt jelenti, hogy (6, 24) képletben az m_0^2 állandó helyére nullát írunk. Ha most ebben a skálában a tömegek négyzetét maguknak a részecskéknek a jelével helyettesítjük, azt kapjuk, hogy a (6, 26) determináns $4/3 hg$ -vel egyenlő. Mivel g K^* tömege, h -t pedig fentebb definiáltuk,

$$\omega\varphi = \frac{4}{3}K^*(\omega + \varphi - 2K^*) \quad (6, 27)$$

vagy, a tömegnégyzetekkel

$$\begin{aligned} [m^2(\omega) - m^2(\varrho)][m^2(\varphi) - m^2(\varrho)] &= \\ &= \frac{4}{3}[m^2(K^*) - m^2(\varrho)][m^2(\varrho) + m^2(\omega) - 2m^2(K^*)]. \end{aligned} \quad (6, 28)$$

A kísérletek hibahatárán belül a tömegek kísérletileg meghatározott értékei ezt a relációt kielégítik. Világos, hogy a leírt eljárásban olyan feltételezéseket használtunk, melyeknek nincs mélyebb értelme. Formálisan két közös, $h'(\overline{\omega}\varphi + \overline{\varphi}\omega)$ típusú kölcsönhatást kellett vennünk, bevezetve két új állandót, h' -t és h -t. A kísérlettel való összehasonlítás ebben az esetben valamilyen relációt eredményezhetne h és h' között, a tömegek között azonban nyilván semmilyen reláció nem merülne fel.

Schwinger megoldása a $h' = \frac{2\sqrt{2}}{3}g$ választásnak felel meg. Hogy van-e ennek a választásnak valamilyen mélyebb értelme, azt az elmélet további fejlődése meg fogja mutatni.

7. §. Az izotóp multiplettek felhasadása

Az unitér multiplettek felhasadását leíró séma kibővíthető úgy, hogy magába foglalja a töltésmultiplettek felhasadását is, amelyek az eddigiekben a H_3^3 és H_{33}^{33} terekben degeneráltak maradtak.

A kiterjesztés legegyszerűbb módja az unitér multiplettnak a hipertöltés és a töltés kölcsönös felcserélésére vonatkozó szimmetriáján alapul. Még egyszer kiírjuk a barionoktett mátrixát:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \Sigma^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \Lambda^0 & \vdots & \Sigma^- & \Xi^- \\ \hline & & & \\ \Sigma^+ & \vdots & -\frac{1}{\sqrt{2}} \Sigma^0 + \frac{1}{\sqrt{6}} \Lambda^0 & \Xi^0 \\ -p & \vdots & n & -\sqrt{\frac{3}{2}} \Lambda \end{pmatrix}. \quad (7, 1)$$

Vizsgáljuk meg a jobb alsó sarokban elkerített mátrixnak megfelelő alcsoportot. Ennek szerkezete szemmel láthatóan hasonló az izotóp spin-mátrixok szerkezetéhez; ennek kvantumszámát K -spinnek nevezzük. A K -multiplett komponensei ugyanúgy vannak meghatározva, mint a T -multiplett (izotóp multiplett) komponensei. A mátrix spurja $\sqrt{6/2}$ -el való szorzás után $K=0$ esetére (vö., hogyan kapható Λ a T multiplett mátrixából):

$$\Phi_0 = \frac{1}{2}(\sqrt{3}\Sigma^0 + \Lambda^0). \quad (7, 2)$$

Az elkerített $2 \cdot 2$ -es mátrix spurjából kivonva annak felét, $K=1$ esetére a következő függvényt kapjuk:

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \Sigma^0 + \sqrt{\frac{3}{8}} \Lambda & \Xi^0 \\ n & \frac{1}{2\sqrt{2}} \Sigma^0 - \sqrt{\frac{3}{8}} \Lambda \end{pmatrix}. \quad (7, 3)$$

(7,3) mátrix elemei Φ_1 három komponenséből állnak: n , $\frac{1}{2}(-\Sigma^0 + \sqrt{3}\Lambda)$, Σ^0 , hasonlóan ahhoz, hogy a Σ izotóp mátrix a Σ^+ , Σ^0 , Σ^- komponensekből tevődik össze.

Végül, két függvény K -spinje $1/2$:

$$\Phi_{1/2}^{(1)} = (\Sigma^-, \Xi^-), \quad \Phi_{1/2}^{(2)} = (\Sigma^+, -p). \quad (7, 4)$$

E függvények minden komponensének egyforma töltése van ahhoz hasonlóan, hogy az izotóp multiplett komponenseinek egyforma hipertöltése van.

A töltést nem zavaró perturbációt a H_1^1 és H_{11}^{11} térkomponensekkel vezetjük be. Itt most nem hanyagolhatjuk el H_{11}^{11} teret, mivel az izotóp multiplettek felhasadásához vezető folyamatok egyike egy foton elnyelése vagy kibocsátása; egy ilyen folyamat mátrixeleme úgy transzformálódik, mint H_1^1 négyzete, vagy — ami ugyanaz — mint H_{11}^{11} .

A perturbáló tér komponenseinek ugyanazok a kvantumszámai, mint a megfelelő barion- vagy mezonmultiplettek komponenseinek (kétféle tér!), mivel az

osztályozás nyilván nincs kapcsolatban a részecskék konkrét választásával. H_{11}^{11} tér úgy transzformálódik, mint egy 27-plet megfelelő komponense. A gyenge kölcsönhatások elméletében H_3^1 és H_1^3 terek fognak szerepet játszani, amelyeknek töltése és ritkasága van (úgy transzformálódnak, mint K^+ és K^-). Ugyanígy lehet vizsgálni azokat a tereket, amelyek dekuplettként transzformálódnak. A dekuplett egyetlen olyan komponense, amely sem töltését, sem hipertöltését nem változtatja, ez az a komponens, amely úgy transzformálódik, mint Σ^{+0} . Ezt külön megvizsgáljuk. Ily módon, a tömegjárulék számára vegyük ezt a kifejezést:

$$\Delta M = \alpha \bar{\Psi}_x^1 \Psi_1^x + \beta \bar{\Psi}_1^x \Psi_x^1 - 2\gamma \bar{\Psi}_1^1 \Psi_1^1. \quad (7, 5)$$

A régi felhasadással együtt ezt kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} m(\Xi^-) &= m_0 + a + \alpha, \\ m(\Xi^0) &= m_0 + a, \\ m(\Sigma^-) &= m_0 + \alpha, \\ m(\Sigma^0) &= m_0 + \frac{1}{2}(\alpha + \beta) - \gamma, \\ m(\Sigma^+) &= m_0 + \beta, \\ m(\Lambda) &= m_0 + \frac{2}{3}(a + b) + \frac{1}{6}(\alpha + \beta) - \frac{1}{3}\gamma, \\ m(n) &= m_0 + b, \\ m(p) &= m_0 + b + \beta, \\ m(\Lambda\Sigma) &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(\alpha + \beta) - \frac{2}{\sqrt{3}}\gamma. \end{aligned} \right\} \quad (7, 6)$$

γ együtthatót a következőképpen becsülhetjük meg:

$$\gamma = m(\Sigma^0) - \frac{1}{2}[m(\Sigma^+) + m(\Sigma^-)]. \quad (7, 7)$$

A kísérleti tömegértékekből következik, hogy $\gamma = -0,95 \pm 0,20$. $\gamma = 0$ értéket helyettesítünk be. Ezután (7, 6)-ból még egy kifejezés származik, amely három tömegkülönbséget köt össze:

$$[m(\Xi^-) - m(\Xi^0)] - [m(p) - m(n)] = m(\Sigma^-) - m(\Sigma^+), \quad (7, 8)$$

amely igen jól összeegyeztethető a kísérleti eredménnyel:

$$\left. \begin{aligned} m(\Xi^-) - m(\Xi^0) &= 6,5 \pm 1,0, \\ m(p) - m(n) &= -1,3, \\ m(\Sigma^-) - m(\Sigma^+) &= 7,7 \pm 0,3. \end{aligned} \right\} \quad (7, 9)$$

Térjünk vissza most a dekuplett típusú perturbációhoz. Ha — mint eddig — megköveteljük, hogy a hipertöltés a rendszerben ne változzék, akkor a dekuplett egyetlen olyan tagja — H^{123} — transzformálódik Σ^{0*} szerint, melyre $Q = Y = 0$. A dekuplett tömegjáruléka:

$$(\Delta M)_g = \varepsilon_{abc} H^{ade} \bar{\Psi}_a^b \Psi_e^c + \varepsilon^{ade} H_{abc} \bar{\Psi}_d^b \Psi_e^c.$$

Ha csak a H^{123} -mal és H_{123} -mal arányos tagokat tartjuk meg, és elvetjük azokat, amelyek (7,5) állandóinak megváltozását okozzák:

$$(\Delta M)_d = \delta_1(\bar{\psi}_1^1 \psi_2^2 - \bar{\psi}_2^1 \psi_1^2) + \delta_2(\bar{\psi}_2^2 \psi_1^1 - \bar{\psi}_1^2 \psi_2^1). \quad (7, 10)$$

Innen származik $\Sigma^0 - \frac{1}{2}(\delta_1 + \delta_2) = \frac{1}{2} - \delta$, $\Lambda - \frac{1}{6}\delta$, $\Sigma^+ - \delta_1$ és $\Sigma^- - \delta_2$ tömegjáruléka. Nem kerülünk ellentmondásba a kísérleti adatokkal, ha a $\delta_1 = \delta_2 = 0$ helyettesítéssel élünk. Vizsgáljuk most Λ és Σ keveredését. Λ és Σ — melyek az izotóp spin közös állapotai voltak — elektromágneses kölcsönhatásuk miatt összekeverednek, megtartva az izotóp spin vetületének $T_3 = 0$ értékét. (A jelenség hasonló a spinszingulett és spintriplett mágneses térben való keveredéséhez). (7, 6)-ba $\gamma = 0$ -t helyettesítve:

$$m(\Lambda\Sigma) = \frac{1}{\sqrt{3}} [m(\Xi^-) - m(\Xi^0) - m(n) + m(p)]. \quad (7, 11)$$

A kísérleti tömegérték:

$$m(\Lambda\Sigma) = 1,5 \pm 0,4 \text{ MeV}. \quad (7, 11')$$

Ahonnán a fizikai (kevert állapotokra (Dalitz^[D7]):

$$\left. \begin{aligned} \Lambda_{fiz} &= \Lambda \cos \alpha + \Sigma^0 \sin \alpha, \\ \Sigma_{fiz} &= -\Lambda \sin \alpha + \Sigma^0 \cos \alpha, \end{aligned} \right\} \quad (7, 12)$$

ahol

$$\operatorname{tg} 2\alpha = -\frac{m(\Lambda\Sigma)}{m(\Sigma) - m(\Lambda)} = -0,019 \pm 0,006. \quad (7, 13)$$

α szög jellemzi a $T=0$ és $T=1$ értékhez tartozó állapotok keveredésének mértékét. Mivel ezeknek az állapotoknak a semleges komponensei a töltésszimmetriára ($p \rightleftharpoons n$ és $\pi^+ \rightleftharpoons \pi^-$ csere) nézve különböző párosságúak, azért (7, 13) jellemző a Λ -hiperon töltésszimmetriájától való eltérés fokára. Az α szög mérésére használható reakcióra két példa:

$$\pi^+ + \delta \rightarrow \Lambda + p + K^+ \quad \text{és} \quad \pi^- + d \rightarrow \Lambda + n + K^0.$$

A barionoktetthez hasonlóan vizsgálható a bariondekuplett. Ha itt is a leg-alacsonyabb multipólkölcsönhatásra korlátozódunk, akkor az unitér felhasadással analóg módon azt kapjuk, hogy a szintek ekvidisztans módon hasadnak fel, tehát

$$\begin{aligned} m(\Delta^{++}) - m(\Delta^+) &= m(\Delta^+) - m(\Delta^0) = m(\Delta^0) - m(\Delta^-) = \\ &= m(\Sigma^{*+}) - m(\Sigma^{*0}) = m(\Sigma^{*0}) - m(\Sigma^{*-}) = m(\Xi^{*0}) - m(\Xi^{*-}). \end{aligned} \quad (7, 14)$$

A lineáris függéstől való eltérés magasabb multipolaritású kölcsönhatás hozzákeveredését fogja jelezni.

A mezonoktettek esetében a (7, 10) reláció azonossággá válik. A pszeudoskalár oktetten azonban kérdéses, hogy milyen természetű a π^0 és π^+ -mezonok tömegkülönbsége, amelynek a 8-pólus-közelítésben nullának kell lennie. Ezt a H_{11}^{11} típusú elektromágneses kölcsönhatás számlájára kell írni.

(7, 16) képletet egyszerűbb alakra lehet hozni, amelyben a Σ^0 tömege nem tolódik el. A H_g^g tér kvantumszámait $Q = Y = 0$ kell, hogy legyenek, és olyan diagonál-

mátrixot alkot, melynek főátlójában az $A, -A, +B, -B$ elemek állnak, ahol A és B önkényes anyagi számok.

Vonjuk ki ebből a mátrixból az $\frac{1}{2}B$ -vel szorzott egységmátrixot. Ez a művelet egyszerűen a tömegskála eltolódására vezet, mivel nem okoz felhasadást. Észrevesszük, hogy így módon a Σ^0 tömege válik az egységünké.

Az $A - \frac{1}{2}B = \kappa$ és $\frac{3}{2}B = -\lambda$ jelölésekkel a teref a következő mátrix alakjában kaphatjuk meg:

$$H_b^a = \begin{pmatrix} \kappa & 0 & 0 \\ 0 & -\kappa & 0 \\ 0 & 0 & \kappa \end{pmatrix}. \quad (7, 15)$$

A térkomponenseknek a (6,4) képlet multipólmennyiségeivel való szorzatát a $\alpha = \kappa C_1, \beta = \kappa C_2, a = \lambda C_1, b = \lambda C_2$ jelölésekkel látjuk el. Akkor a (7,15) mátrix felhasználásával (megtartva a $\gamma=0$ feltételt) a következő képletsorozatot kapjuk a barionok tömegére:

$$\left. \begin{aligned} m(\Xi^-) &= m_0 + a + \alpha, \\ m(\Xi^0) &= m_0 + a - \alpha, \\ m(\Sigma^-) &= m_0 + \alpha - \beta, \\ m(\Sigma^0) &= m_0, \\ m(\Sigma^+) &= m_0 - \alpha + \beta, \\ m(\Lambda) &= m_0 + \frac{2}{3}a + \frac{2}{3}b, \\ m(n) &= m_0 + b + \beta, \\ m(p) &= m_0 + b - \beta. \end{aligned} \right\} \quad (7, 16)$$

Az eddig kapott tömegfelhasadási képletek (három volt, mivel a 8 barion tömegét 5 paraméter írja le) nem függtek a választott modelltől. Ha azonban a tér létét komolyan vesszük, akkor a levezetett relációkból következik, hogy $\alpha/\beta = a/b$ vagy (vö. Coleman és Glashow [D1]):

$$\frac{m(\Xi^0) - m(\Xi^-)}{m(n) - m(p)} = \frac{m(\Xi^0) + m(\Xi^-) - 2m(\Sigma^0)}{m(n) + m(p) - 2m(\Sigma^0)}. \quad (7, 17)$$

Ez az egyenlet rosszul teljesül. Bal oldala -5 , a jobb oldala $-0,5$. Ez azt jelenti, hogy az izotóp tömegkülönbségben nagy elektromágneses járulék van. A másik egyenlet is rosszul teljesül. Az

$$\frac{m(\Xi^-) - m(\Xi^0) + m(p) - m(n)}{\frac{1}{2}[m(\Xi^-) + m(\Xi^0) + m(p) + m(n)] - 2\Sigma^0} = 2 \frac{\alpha + \beta}{a - b} \quad (7, 18)$$

mennyiség jellemzi a κ és λ térkomponensek viszonyát. A barionok ismert tömegértékeiből erre a mennyiségre $0,038$ -at kapunk.

Ugyanígy mennyiség számolható ki a pszeudoskalár mezonok tömegnégyzeteiből:

$$\frac{m^2(K^+) - m^2(K^0)}{\frac{1}{2}[m^2(K^+) + m^2(K^0)] - m^2(\pi^2)} = -0,017. \quad (7, 19)$$

A (7, 18) és (7, 19) képletek értelmét megérthetjük, ha a tömegeket a multiplettek közepétől, azaz megfelelően a Σ^0 és π^0 tömegétől számítva, a két formulát így írjuk fel:

$$\frac{\Delta m(\Xi) + \Delta m(N)}{2m_{kp}(\Xi, N)} = 2 \frac{\Delta m(K)}{m_{kp}(K)}, \quad (7, 20)$$

ahol Δn a megfelelő dublettek tömegeinek (nem négyzeteinek!) különbsége, m_{kp} pedig középtávolságuk Σ^0 -tól és π^0 -tól. (7, 20)-ból látszik, hogy univerzális izotóp felhasadásról van szó, amely kisebb pontosságú, mint az unitér felhasadás univerzalitása.

8. §. „Ebihalak” és „ördögök”

„Ott, az ismeretlen ösvényeken
Soha nem látott fenevadak nyomai vannak”

A. Puskin

Nem tartozik a mi feladataink közé az unitér elmélet minden elképzelésének és eredményének ismertetése, és nem mutattunk be pl. olyan fontos, de még kialakulatlan irányzatokat, mint a gyenge kölcsönhatások elmélete, de érdemes megemlítenünk néhány új, eddig még spekulatív elképzelést, mivel ezek arra utalnak, hogy az unitér világ faunája szerfelett szokatlan lehet. A tömegfelhasadás megmutatta, hogy a részecskéknél a vákuummal való kölcsönhatása eredményesen leírható néhány H_b^a tér segítségével, amelynek semleges komponensei, H_3^3 és H_1^1 okozzák az unitér és izotóp felhasadásokat. Kíváncsinos lenne ezeket a tereket reális fizikai terekkel azonosítani, az unitér tér négyzetét új unitér mezonmultiplettnak feleltetve meg. Ilyen mezonoktettet vizsgáltak munkájukban Coleman és Glashow [F3].

Az ebihal fogalma Schwinger (Annals of Phys. 2, 407, 1957) és Salam és Ward (Phys. Rev. Letters 5, 390, 1960 és Revs. Mod. Phys. 33, 428, 1961) munkáiban jelent meg. A mezonoktettet Sakurai [F4] vezette be.

Képzeliük el, hogy a H_b^a tér skalár mezonter. Ha felírjuk ennek a térnek a mátrixát a pseudoskalár mezonok mátrixával analóg módon, akkor a diagonális komponenseket két semleges részecske alkotja, amelyeket — az unitér tulajdonságok azonosságának aláhúzására — π'^0 és η' -vel jelölünk (az oktett többi π'^{\pm} , K'^{\pm} , K'^0 , \bar{K}'^0 komponensei a töltés és a hipertöltés cseréjével vannak kapcsolatban, és nem járulnak hozzá a felhasadáshoz, éppúgy, mint a H_b^a tér hasonló komponensei).

Mivel π'^0 és η' kvantumszámai ugyanazok, mint a vákuumé, ezek nyomtalanul annihilálódhatnak — ha csak a tömegük nulla — pl. megfigyelhetetlen kötött anti-proton-proton párrá változva, amelynek az össztömege nulla!

Ez azt jelenti, hogy formálisan létezik egy virtuálisan nulla energiájú semleges mezon kisugárzásának folyamata. Ez különböző megfigyelhetetlen állapotokba megy át; mivel a diagramokon az ilyen folyamatot olyan egyenessel ábrázolják, amelynek a végén egy „paca” van, az ilyen mezont „ebihalnak” nevezzük.¹²

¹² Az olvasó persze észrevette, hogy az ebihal a különböző szerzőktől a szimmetriasértési folyamatok leírására bevezetett „spurionok” közé tartozik. A közönséges π^0 és η -mezonoknak is lehet ebihal-diagramja — nyilván —, de ha ezek kölcsönhatása unitér invariáns, az ilyen ebihalak nem okoznak felhasadást.

Ez a séma, — nyilván — formálisan megegyezik a H_b^a sémával. Ha kiegészítjük a mondottakat azzal, hogy az ebihalnak az összes multiplettekkel való kölcsönhatása univerzális állandóval írható le, akkor olyan modellt kapunk, amelyben a különböző multiplettekkel kapcsolatos intervallumszabályok magától értetődő interpretációt nyernek.

A skalár mezón tömege — amelyből a szabad állapotban levő ebihal felépül — különbözhet nullától. Ebben az esetben a szerzők modelleket ajánlanak ezeknek a következő rezonanciákkal lehetséges azonosításra: $K' \rightarrow \kappa$ (730 MeV), $\pi' \rightarrow \zeta$ (570 MeV) és a kb. 770 MeV-es η' tömege közel esik a q^0 -éhoz; ezzel a három komponenssel a tömegnégyzetek jól kielégítik az intervallumszabályt:

$$m^2(K') - m^2(\pi') = 0,22, \quad m^2(\eta') - m^2(\pi') = 0,28. \quad (8, 1)$$

Azonban a rezonanciák kvantumszámait és egyáltalán a létezésük még elég bizonytalanul vannak megállapítva, és ezeket az egyezéseket nem szabad még komolyan venni.¹³

Az ebihalak leírását másképpen is meg lehet kísérelni Gell — Mann módszerével a „kvarkok” — unitér spinorok — segítségével, amelyeket oroszul (magyarul) — úgy látszik — „ördögöknek” kell nevezni.

A H_b^a teret úgy lehet elképzelni, mint két $\bar{\psi}_b$ és φ^a unitér spinor szorzatát:

$$H_b^a = \bar{\psi}_b \varphi^a. \quad (8, 2)$$

A φ^a unitér spinor komponenseinek $-e/3$, $-e/3$ és $2e/3$ töltése van, a $\bar{\psi}_b$ unitér spinor komponenseinek $e/3$, $e/3$ és $-2e/3$. Éppen ilyen tört értékeket vesz fel a spinorok hipertöltése is.

A törtszámú töltések megjelenése azzal van kapcsolatban, hogy az SU_3 csoportban a Q töltésmátrix és az Y hipertöltésmátrix diagonális és spurjuk zéró. Ha Q és Y sajátértékeit úgy normáljuk, hogy az oktett komponenseire ezek a 0 és ± 1 értékeket vegyük fel, és mivel ezek az értékek a $\bar{\psi}_b$ és φ^a spinorok komponensei töltésének összegei, mindezek a követelmények teljesülnek, ha a töltések $1/3$ többszörösei. Ekkor $1/3 + 1/3 - 2/3 = 0$, és $\bar{\psi}_b$ és φ^a töltéseiből csak a 0 és ± 1 töltéseket lehet összeállítani. Mint korábban is, a $\bar{\psi}_b \varphi^a$ szorzatnak csak a semleges komponensei vesznek részt a kölcsönhatásban.

Ha elfogadjuk (8,2)-t, akkor H_b^a hatása „ördögök” kisugárzásában és elnyelésében nyilvánul meg a diagramnak ugyanabban a pontjában (vagy $\bar{\psi}_b$ és φ^a párok kisugárzásában, melyet annihiláció követ). Ilyen hurok okozza a tömegfelhasadást és egyúttal az ebihalat. Ha azonban $\bar{\psi}_b$ és φ^a szabad állapotban is keletkezhetnek, Gell-Mann sémájához jutunk, amelyet a kísérlet nem támaszt alá.*

¹³ Glashow és Coleman a következő kísérletekre hivatkoznak: G. Alexander et al., Phys. Rev. Letts. 8, 447, 1962; D. H. Mileet et al., Phys. Letts. 5, 279, 1963; S. G. Wojcicki et al., Phys. Letts. 5, 283, 1963; D. B. Lichtenberg, Stanford, Linear Accel. Rep. No. 13 (1963) (nem publikált), 53. l., η : H. Hapopian, W. Selore, Phys. Rev. Letts. 10, 553, 1963; Z. Gioragossian, Phys. Rev. Letts. 11, 85, 1963.

* A legújabb hírek szerint a kvarkokat sikerült kimutatni a kozmikus sugárzásban (a ford.).

Az unitér szimmetria megsértéséért felelős részecskék keresése a neutrínó (amely energiadifferencia formájában hagyott nyomott), utáni vadászatra emlékeztet. Hogyan fog végződni ez az új vadászat? — majd a jövő megmutatja.

Befejezés

A tömegfelhasadás képletei, vagy — ahogyan ezt spektroszkópiai elnevezéssel hívhatjuk — az intervallumszabályok semmiképpen sem merítik ki az unitér szimmetria és szimmetriasértés sémáját. Azonban ezek a formulák alapvető fontosságúak.

Az unitér séma lehetővé tette, hogy a részecskék tömegét egységes, ha még nem is teljesen tökéletes szemszögből vizsgáljuk. Eddig a részecskék tömegeinek különbségét csak bosszantó szimmetriasértésnek tekintették, és úgy látszott, hogy csak a nagy energiák tartományában — ahol ez a különbség jelentéktelenné válhat — lehet megkísérelni elméleti rendszerek felépítését.

Az SU_3 sémában kiderült, hogy a szimmetriasértésnek egyszerű tulajdonságai vannak, és nagyon magától értetődően írható le az unitér multiplettek rendszerében. Felmerül a kérdés, nem lehet-e a szimmetriasértés jellege alapján a multiplettek és a vákuum kölcsönhatásának tulajdonságait tanulmányozni? Ez a kérdés magától értetődővé válik, ha visszaemlékezünk arra, hogy az izotóp szimmetria megsértését elektromágneses tér okozza (a részecskék és a vákuum elektromágneses terének kölcsönhatása); a különböző reakciókban az izotóp szimmetriától való eltérést tanulmányozva, elvben lehetséges lenne elég sok tájékoztatást kapni erről a kölcsönhatásról, noha ebben az esetben a felhasadás kicsiny). Ezt, persze, nem kell megtennünk, hiszen az elektromágneses tér kutatására tökéletesebb módszereink vannak. Más a helyzet a H_3^3 tér kölcsönhatásának esetében, amely az SU_3 szimmetriát sérti meg.

Ehhez a kölcsönhatáshoz, amely ráadásul igen erős, nem kapcsolódik semmilyen ismert tér. Ezért a bomlásoknak és a reakcióknak az SU_3 csoport szempontjából való vizsgálata jó kiindulópontul szolgálhat a részecskék és a vákuum kölcsönhatására vonatkozó információkhoz.

A keletkezett rendszerek egyszerűsége arra enged következtetni, hogy éppen ebben az irányban várható jelentős haladás és az erős kölcsönhatás törvényeinek megértése.

FÜGGELÉK

1. Oktett, mint 8-as vektor

Az SU_2 algebraiban a másodrendű tenzor komponensei háromdimenziós vektort alkotnak. Két ábrázolás között a (2, 22) Pauli-formula mátrixai létesítenek kapcsolatot. Ugyanígy az unitér oktetet 8-as vektorral lehet helyettesíteni. Gell-Mann [G2,3] jelöléseivel az A_b^a oktet:

$$A_b^a = \begin{pmatrix} A_3 + \frac{1}{\sqrt{3}} A_8, & A_1 - iA_2, & A_4 - iA_5 \\ A_1 + iA_2, & -A_3 - \frac{1}{\sqrt{3}} A_8, & A_6 - iA_7 \\ A_4 + iA_5, & A_6 + iA_7, & -\frac{2}{\sqrt{3}} A_8 \end{pmatrix}.$$

Ebben az alakban nyilván tetszőleges oktetet fel lehet írni. Megjegyezzük, hogy a (4,4) unitér spinor komponenseit szokás így is jelölni: F_α ($\alpha=1, 2, \dots, 8$).

A_b^a -t úgy fejezhetjük ki legegyszerűbben A_α -val, ha bevezetjük a nyolc λ_α mátrixot, amelyeknek itt a Pauli-mátrixokhoz hasonló szerepe van:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

A (λ_1, λ_2) , (λ_4, λ_5) és (λ_6, λ_7) mátrixpárok tulajdonképpen σ_1 és σ_2 Pauli-mátrixok három dimenziós alterekben. Itt két darab σ_3 típusú mátrix van, mivel fennáll a $\text{Sp}\lambda_\alpha=0$ kiegészítő feltétel.

A λ_α mátrixok kielégítik a következő egyenleteket:

$$\text{Sp}\lambda_\alpha\lambda_\beta = 2\delta_{\alpha\beta},$$

$$[\lambda_\alpha, \lambda_\beta] \equiv \lambda_\alpha\lambda_\beta - \lambda_\beta\lambda_\alpha = 2if_{\alpha\beta\gamma}\lambda_\gamma,$$

$$\{\lambda_\alpha, \lambda_\beta\} \equiv \lambda_\alpha\lambda_\beta + \lambda_\beta\lambda_\alpha = 2d_{\alpha\beta\gamma}\lambda_\gamma + \frac{4}{3}\delta_{\alpha\beta}.$$

Az $f_{\alpha\beta\gamma}$ antiszimmetrikus és $d_{\alpha\beta\gamma}$ szimmetrikus „szerkezeti” állandókat az

$$f_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{4i} \text{Sp} [\lambda_\alpha \lambda_\beta] \lambda_\gamma; f_{123} = 1,$$

$$f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{516} = f_{367} = \frac{1}{2},$$

$$f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2};$$

$$d_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{4i} \text{Sp} \{ \lambda_\alpha, \lambda_\beta \} \lambda_\gamma; d_{118} = d_{228} = d_{338} = -d_{888} = \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$d_{146} = d_{157} = -d_{247} = d_{256} = d_{344} = d_{355} = -d_{366} = -d_{377} = \frac{1}{2},$$

$$d_{448} = d_{558} = d_{668} = d_{778} = -\frac{1}{2\sqrt{3}}$$

képletből kapjuk.

A többi, nullától különböző komponenseket indexcserével kapjuk, az antiszimmetrikus $f_{\alpha\beta\gamma}$ esetében az előjel figyelembe vételével.

Nyilván:

$$A_b^a = \sum_{a=1}^7 A_a (\lambda_a)_b^a,$$

$$2A_a = \text{Sp} A \lambda_a \equiv A_b^a (\lambda_a)_a^b.$$

f és d együtthatók teszik lehetővé az oktettek szorzását. Az oktettek szorzásának képlete,

$$(X^\pm)_b^a = \frac{1}{2} (A_c^a B_b^c \pm A_b^c B_c^a)$$

így írható át:

$$(X^\pm)_x = i \begin{pmatrix} d_{\alpha\beta\gamma} \\ f_{\alpha\beta\gamma} \end{pmatrix} A_\alpha B_\beta.$$

A szimmetrikus szorzatot néha D -szorzatnak, az antiszimmetrikusat F -szorzatnak nevezik.

2. \mathcal{C} -paritás

Tekintsünk két oktett-transzformációt: 1. az R -transzformációt — az oktett sorainak és oszlopainak felcserélését, 2. a C töltéskonjugációt. Könnyű belátni, hogy a két ábrázolás

$$\mathcal{C} = RC$$

szorzata a mezon- (hermitikus) oktettek elemeit helyükön hagyja, és mindegyiket -1 -gyel vagy 1 -gyel szorozza meg (mivel $\mathcal{C}^2 = 1$). Ily módon a hermitikus oktettek jellemző új kvantumszám lép fel: a \mathcal{C} -paritás.

Nyilvánvaló, hogy a \mathcal{C} -paritást a diagonálisban álló és R -transzformációkor a helyükön maradó részecskék töltésének párossága határozza meg. Ezért a pszeudoskalár mezonoktetre $\mathcal{C} = +1$, a vektormezon-oktetre pedig $\mathcal{C} = -1$.

A 8-as vektor komponenseinek definíciójából látható, hogy az A_1, A_3, A_4, A_6, A_8 komponensek töltésének paritása megegyezik és ellentétes az A_2, A_5, A_7 komponensek töltésparitásával.

IRODALOM

A) A régi SU_3 elmélet

- [1] S. Sakata: Progr. Theor. Phys. 16, 686, 1962.
- [2] M. Ikeda, S. Ogawa and Y. Ohnuki: Progr. Theor. Phys. 22, 715, 1959.
- [3] L. Okun: Ann. Rev. Nucl. Sci. 9, 61, 1959.
- [4] M. A. Markov: Hiperonü i K-mezonü, M.—L., Fizmatgiz, 1958.

B) Áttekintések az SU_3 -ról

- [1] A. E. Edmonds: Proc. Roy. Soc. A268, 567, 1962.
- [2] R. E. Behrends, J. Dreitlein, D. Fronsdal and B. W. Lee, Revs. Mod. Phys. 34, 1, 1962.
- [3] J. J. Swart: Revs. Mod. Phys. 35, 916, 1963.
- [4] Y. Ne'eman: Rept. to the Intern. Conf. on Nuclear Structure, Stanford, June 1963 (nyomtatásban).
- [5] G. F. Chew, M. Gell-Mann and A. H. Rosenfeld: Sci. Amer. 210, 74, 1964; (orosz fordítást l.: UFN 83, 695, 1964.)
- [6] V. I. Ogijevickij: Lekcii v zimnyej skole. Dubna, 1964.
- [7] Ja. A. Szmorogyinszkij: Ob algebre unytárnoj gruppü Gell-Manna, Dubna, 1961 (preprint) (D-738).
- [8] V. M. Sehtyev: v szb. „Voproszü fiziki elementarnüh csasztyic:”, c. gyűjteményben 3. Jereván 1963, 103. l.
- [9] B. L. Purcey: Proc. Roy. Soc. A275, 284, 1963.

C) Alapvető munkák

- [1] Y. Ne'eman: Nucl. Phys. 26, 222, 1961 (a fordítást l.: „elementárnüje csasztyicü i kompszirujuscije polja”, M. „Mir” kiadó, 1964 (Ecskp)).
- [2] M. Gell-Mann: California Inst. of Technology Synchrotron Laboratory Report CTSL-20 (preprint), 1961 (a fordítást l.: „Ecski”).
- [3] M. Gell-Mann: Phys. Rev. 125, 1067, 1962.
- [4] S. Okubo: Progr. Theor. Phys. 27, 949, 1962.

D) Elektromágneses kölcsönhatás

- [1] S. Coleman and S. L. Glashow: Phys. Rev. Letts. 6, 423, 1961.
- [2] N. Cabibbo and R. Gatto: Nuovo Cimento 21, 872, 1961.
- [3] C. A. Levinson, H. J. Lipkin and S. Meshkov: Nuovo Cimento 23, 236, 1962.
- [4] C. A. Levinson, H. J. Lipkin and S. Meshkov, Phys. Letts. (1964) (nyomtatásban).
- [5] S. P. Rosen: Phys. Rev. Letts. 11, 100, 1963.
- [6] A. J. Macfarlane and E. C. G. Sudarshan: Nuovo Cimento 31, 1176, 1964.
- [7] R. Dalitz: Phys. Rev. Letts. (1964) (nyomtatásban).

E) Gyenge kölcsönhatások

- [1] M. Gell-Mann and M. Levy: Nuovo cimento 16, 705, 1958.
- [2] N. Cabibbo: Phys. Rev. Letts. 10, 531, 1963.
- [3] N. Cabibbo: Phys. Rev. Letts. 12, 62, 1964.
- [4] S. P. Rosen: Phys. Rev. Letts. 12, 408, 1964.
- [5] M. Gell-Mann: Phys. Letts. 8, 214, 1964.
- [6] M. Gell-Mann: Phys. Rev. Letts. 12, 154, 1964.
- [7] G. Zweig (nyomtatásban).
- [8] R. Oehme: Phys. Rev. Letts. 12, 550, 1964.
- [9] M. M. Block: Phys. Rev. Letts. 12, 262, 1964.
- [10] M. Gell-Mann: Gruppo szimmetrii vektorovo i akszialno vektornovo tokov (preprint), Physics (nyomtatásban).

F) Új elképzelések

- [1] *M. Gell-Mann*: Phys. Letts. 8, 214, 1964.
- [2] *J. Schwinger*: Phys. Rev. Letts. 12, 916, 1964; Phys. Rev. (nyomtatásban).
- [3] *S. Coleman* and *S. L. Glashow*: Phys. Rev. 134, B671, 1964.
- [4] *J. Sakurai*: Phys. Rev. 125, 434, 1963.
- [5] *A. Salam* and *J. C. Ward, A.*: Gauge Theory of Elementary Interactions (preprint).

G) Két kísérlet

1. Az Ω -felfedezése

- [1] *V. E. Barnes* et al: (33 szerző!), Phys. Rev. Letts. 12, 204, 1964.

2. A „Kvarkok” létezéséről

- [2] *L. P. Leipuner, W. T. Chu, R. C. Larsen, R. K. Adair*: Phys. Rev. Letts. 12, 423, 1964.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A HIDROGÉNSZÍNKÉPRŐL AZ ÚJ KVANTUMMECHANIKA SZEMPONTJÁBÓL

W. PAULI

Megmutatjuk, hogy valamely egyelektronos atom Balmer-termjei helyesen adódnak az új kvantummechanikából és hogy az eddigi elméletben a szinguláris mozgásokra vonatkozó járulékos tiltásokból adódott nehézségek, melyek különösen a keresztezett terek esetében bukkannak fel, az új elméletben eltűnnek. Külső elektromos és mágneses terek befolyását a hidrogénszínképre ugyancsak tárgyaljuk az új kvantummechanika alapján. A relativisztikus korrekciók tekintetbe vételére, valamint az átmeneti valószínűségek (intenzitások) kiszámítására azonban nem terjed ki még a tárgyalás.

1. § *Az új kvantummechanika alapjai.* Legutóbb Heisenberg¹ a kvantumelmélet alapelveinek olyan megfogalmazását adta meg, amely a többszörösen periodikus rendszerek eddigi elméletéhez képest nagy előrehaladást jelent. A kvantumelmélet ezen Heisenberg-féle felfogása teljes mértékben lemond az elektron mozgásának mechanikai-kinematikai szemléltetéséről az atom stacionárius állapotaiban, s a klasszikus-kinematikai mennyiségek időbeli középértékein kívül csupán harmonikus parciálrezgéseket vezet be; minden átmenethez, mely két stacionárius állapotot köt össze, egy-egy ilyen parciális rezgést rendel, amelyek közvetlen kapcsolatban állnak a rendszer spontán átmeneti valószínűségeivel. Legyen

$$x_m^n = a_m^n e^{2\pi i(\nu_m^n t + \delta_m^n)}$$

egy adott atomi elektron x Descartes-koordinátájának valamely n állapotból egy másik m állapotba vezető átmenetet jellemző parciálrezgése; a szóban forgó átmenet spontánemissziós valószínűsége A_m^n együtthatójának értékéhez ez az

$$\frac{1}{h\nu_m^n} \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} (2\pi\nu_m^n)^4 |x_m^n|^2 \cdot 2$$

járlékot szolgáltatja. Míg a korábbi elméletben ez az összefüggés a korrespondencia-elvnek megfelelően csupán a nagy kvantumszámok esetében asszimptotikusan volt érvényesnek tekintendő, azt immár az x_m^n amplitúdók általános érvényű definíójaként kell felfognunk; általánosabban az egyes átmeneti folyamatokhoz rendelt parciális rezgéseket a kibocsátott sugárzás intenzitása és polarizációja fizikailag meghatározza. Ezek a parciális rezgések azonban nem foglalhatók többé össze meghatározott atomi „elektronpályákká”, minthogy azok nem stacionárius állapotoknak, hanem átmeneti folyamatoknak felelnek meg.

* ZS. f. Phys. 36, 336, 1926.

A Heisenberg-től megalapozott kvantumelmélet további kiépítését azután Born és Jordan², Dirac³, valamint Born, Heisenberg és Jordan⁴ végezte el. Az így következetes matematikai rendszerbe foglalt elméletben valamennyi, korábban a klasszikus mechanikából átvett összefüggés helyét hasonlóan képzett, az egyes atomi részecskék koordinátáihoz tartozó x_n^n időbeli középértékek és x_m^n parciális rezgések között fennálló kvantumelméleti összefüggések foglalják el. Ezen összefüggések megfogalmazásához célszerűnek bizonyult minden x klasszikus kinematikai mennyiséghez egy-egy mátrixot rendelni; ebben az átlós elemek helyén az x_n^n időbeli középértékek állnak, melyek az egyes stacionárius állapotokhoz tartoznak, az (n, m) (azaz: n -edik sor, m -edik oszlop) és (m, n) (azaz: m -edik sor, n -edik oszlop) helyeket pedig az

$$x_m^n = a_m^n e^{2\pi i(v_m^n t + \delta_m^n)} \quad \text{és} \quad x_n^m = a_n^m e^{2\pi i(v_n^m t + \delta_n^m)} \quad (1)$$

komplex-konjugált rezgések foglalják el, ahol $a_m^n = a_n^m$ pozitív valós és

$$v_n^m = -v_m^n, \quad \delta_n^m = -\delta_m^n. \quad (2)$$

Az x_m^n harmonikus rezgés az m -ből n -be vezető átmenethez tartozik, az x_n^m harmonikus rezgés pedig a fordított átmenethez, mely n -ből m -be vezet. Így ezen átmenetek egyike emissziós, másika pedig abszorpciós átmenet.

Az \dot{x} időderiválthoz azt a mátrixot rendeljük, amelynek egyes elemei az x mátrix megfelelő elemeit az idő szerint differenciálva adódnak; azaz

$$\dot{x}_m^n = 2\pi i v_m^n x_m^n. \quad (3)$$

Speciálisan $\dot{x}_n^n = 0$, vagyis \dot{x} átlós elemei eltűnnek. A $v_n^m = -v_m^n$ összefüggés folytán itt is igaz, hogy \dot{x}_m^n és \dot{x}_n^m komplex-konjugáltak (a mátrixok hermitikusak). Az E energiához átlós mátrixot kell rendelni, vagyis olyat, amelynek nem-átlós elemei eltűnnek. Az $E_n = E_n^n$ átlós elem az energia értékét adja meg az n indexszel jelzett kvantumállapotban, a frekvenciafeltétel szerint írható tehát:

$$h v_m^n = E_n^n - E_m^m, \quad (4)$$

ami a fent megadott $v_n^m = -v_m^n$, $v_n^n = 0$ előírással összhangban van.

Lényeges körülmény, melyre Heisenberg mutatott rá, hogy két mátrix, x és y szorzatának, tekintettel a frekvenciafeltételre, értelmes jelentést tulajdoníthatunk. A két mátrix, x és y szorzatát, az xy mátrixot az

$$(xy)_m^n = \sum_l x_l^n y_m^l \quad (5)$$

képlet definiálja. Minthogy (I)-ből következik a

$$v_l^n + v_m^l = v_m^n \quad (6)$$

kombinációs összefüggés, $(xy)_m^n$ valóban ugyancsak v_m^n frekvenciájú harmonikus rezgés, ha x_l^n és y_m^l harmonikus rezgések a v_l^n , ill. a v_m^l frekvenciával. Itt fel kell tennünk, hogy a δ_m^n fázisokra teljesül a

$$\delta_l^n + \delta_m^l = \delta_m^n \quad (7)$$

kombinációs összefüggés.

Két mátrix szorzatára az összes megszokott számítási szabály érvényes a kommutatív törvényt kivéve; az \mathbf{xy} szorzat általában különbözik \mathbf{yx} -tól. Így pl. az $\mathbf{Ex} - \mathbf{xE}$ különbség, ahol \mathbf{E} az energia átlós mátrixát jelenti, a szorzatok pedig a (4) általános előírás szerint számítandók ki, a (3) összefüggés és az (I) frekvenciafeltétel értelmében egyszerű kapcsolatba hozható az \mathbf{x} mátrix idő szerint képzett deriváltjával, $\dot{\mathbf{x}}$ -tal:

$$\mathbf{Ex} - \mathbf{xE} = \frac{h}{2\pi i} \dot{\mathbf{x}}. \quad (7)$$

Ez az összefüggés bármely \mathbf{x} mátrixra érvényes.

Az \mathbf{x} mátrixok meghatározásához valamely adott mechanikai rendszer esetében szükséges összefüggéseket, az új kvantummechanika fizikai alaptörvényeit, *Born* és *Jordan* az alább következő alakra hozták; azokat azonnal tetszőleges számú szabadsági fokkal rendelkező rendszerekre írjuk fel. Jelöljék \mathbf{q}_ϱ és \mathbf{p}_ϱ ($\varrho = 1, \dots, f$) az atomi részecskék Descartes-koordinátáit, valamint a megfelelő impulzusokat ($\mathbf{p}_x = m\dot{\mathbf{x}}$). Ekkor az (I) frekvenciafeltétel mellett fennállnak a

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{p}_\varrho \mathbf{p}_\sigma - \mathbf{p}_\sigma \mathbf{p}_\varrho &= 0, & \mathbf{q}_\varrho \mathbf{q}_\sigma - \mathbf{q}_\sigma \mathbf{q}_\varrho &= 0, \\ 0, & \text{ha } \varrho \neq \sigma, \\ \mathbf{p}_\varrho \mathbf{q}_\sigma - \mathbf{q}_\sigma \mathbf{p}_\varrho &= \begin{cases} \frac{h}{2\pi i} \cdot \mathbf{1}, & \text{ha } \varrho = \sigma \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (II)$$

„kvantumfeltételek”. Itt $\mathbf{1}$ az egységmátrixot jelenti (melynek nem-átlós elemei eltűnnek, átlós elemei pedig mind 1-gyel egyenlők). Amint *Kramers*⁵ megmutatta, ezek az összefüggések *Ladenburg*, *Kramers*, valamint *Kramers* és *Heisenberg* kvantumelméleti diszperziós képletei alapján azon követelmény segítségével értelmezhetők, hogy az egyes atomi részecskék rövidperiódusú külső erőkkkel szemben szabad részecskékként viselkednek. Végül mint utolsó kvantumtörvény, érvényes az energiafeltétel:

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{E} \text{ (átlós mátrix)}. \quad (III)$$

A $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ mátrixfüggvény meghatározott mechanikai rendszert jellemez, és a legkézenfekvőbb feltevés, hogy az Descartes-koordináták használata mellett a megfelelő klasszikus függvénnyel formálisan megegyezik. Szorítkozhatunk arra az esetre, amikor az a kinetikus és a potenciális energiának megfelelően két részből áll, melyek egyike csak a \mathbf{p} -ktől, másika pedig csak a \mathbf{q} -ktől függ. Egyelőre a (4) szorzási szabálynak megfelelően csak olyan mátrixfüggvények vannak értelmezve, amelyek a \mathbf{p} -k és a \mathbf{q} -k (pozitív és negatív hatványokat tartalmazó) hatványsorai alakjában írhatók fel. Erre az esetre *Born*, *Heisenberg* és *Jordan* megmutatta, hogy az (I), (II) és (III) alaptörvények következményeiként olyan mátrixrelációk adódnak, amelyek a klasszikus mechanika mozgásegyenleteivel teljes analógiában állanak és amelyek a jobb oldalon fellépő parciális differenciálhányadosok értelemszerű definíciója mellett így írhatók:

$$\dot{\mathbf{q}}_\varrho = \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{p}_\varrho}, \quad \dot{\mathbf{p}}_\varrho = -\frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}_\varrho}. \quad (8)$$

Még kiemeljük, hogy a sorrend, melybe a mátrixokban a vizsgált rendszer stacionárius állapotait elrendezzük, közömbös, és a „kvantumszám” fogalma az

új elméletben nem lép fel alaptörvényekben. Az új elméletben továbbá, ellentétben a régi elmélettel, az átmeneti valószínűségek értékei elvben kicsiny kvantumszámokra is mennyiségileg meg vannak határozva.

2. § *Általános áttekintés az alább következő számítások módszereiről és eredményeiről.* Azt tűztük ki feladatul, hogy az új elméletet egyetlen elektronnal rendelkező atomra alkalmazzuk. Mindazonáltal még nem sikerült minden, az ilyen hidrogénszerű atomokra vonatkozó következményt az új elmélet alaptörvényeiből lezármasztatnunk. Speciálisan még nem kíséreltük meg a hidrogénszerű spektrumok átmeneti valószínűségeinek kiszámítását, hanem csak a hidrogén atom stacionárius állapotaihoz tartozó energiaértékek meghatározását végeztük el a külső erőktől mentes esetben, valamint külső elektromos és mágneses terek jelenlétében (az átmeneti valószínűségeket kiküszöbölve). A relativisztikus korrekciós tagokat egyelőre figyelmen kívül hagyjuk. Eredményként a Balmer-termek, valamint a Stark-effektus adódnak, összhangban a tapasztalattal. Eltűnnek továbbá a nehézségek, melyek az eddigi elméletben olyan szinguláris mozgásokra vonatkozó járulékos tiltások folytán léptek fel, amelyek folyamán az elektron a magot tetszőlegesen megközelíti; ezek a nehézségek különösen a keresztezett elektromos és mágneses terek esetében jelentkeztek. Éppen ezért legyen szabad itt ezeket a nehézségeket közelebbről megvilágítanunk.

Kiindulásképpen vegyük szemügyre először a párhuzamos elektromos és mágneses terek esetét. Jelölje e és m_0 az elektron töltését, ill. tömegét, Ze a magtöltést, a a pálya fél nagytengelyét, F és H az elektromos, ill. mágneses térerősséget; ekkor a Larmor-frekvenciát

$$\omega_H = \frac{eH}{4\pi m_0 c}, \quad (9)$$

a Stark-effektus szekuláris frekvenciáját pedig

$$\omega_F = \frac{3}{4\pi} \sqrt{\frac{a}{Zm_0}} F = \frac{3}{2} eF \frac{a_1}{h} n \quad (10)$$

adja meg, ahol

$$a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 Ze^2 m_0}$$

az atom egykvantumos körpályájának sugarát jelenti. A terek jelenlétében két járulékos kvantumfeltételünk van, melyek a pálya elektromos középpontját a maggal összekötő egyenesszakasznak a térirányra vetett vetületét, z -t a

$$z = \frac{3}{2} a \frac{s}{n}, \quad (11)$$

a térrel párhuzamos P_z impulzusmomentumot pedig a

$$P_z = m \frac{h}{2\pi} \quad (12)$$

képletnek megfelelően rögzítik. Adott n és $|m| \leq n$ mellett, a járulékos tiltásoktól

egyelőre eltekintve, a Stark-effektus s kvantumszáma a zérusra szimmetrikusan fekvő, egymást két egységnyi lépésekben követő

$$\begin{aligned} s = -(n - |m|), -(n - |m| - 2), \dots \\ (n - |m| - 2), n - |m| \quad (|m| \leq n) \end{aligned} \quad (13)$$

értékeket veszi fel⁶. A terek jelenlétében fellépő járulékos energiát az

$$E_1 = (so_F + mo_H)h \quad (14)$$

képlet adja meg. A keresztezett terek általánosabb esetét szem előtt tartva célszerű o_F és o_H helyett az

$$\omega_1 = o_H + o_F, \quad \omega_2 = |o_H - o_F|$$

frekvenciákat bevezetni. Ekkor (13) és (14) helyett írható:

$$E_1 = \left(\frac{n}{2} - n_1\right)\omega_1 h + \left(\frac{n}{2} - n_2\right)\omega_2 h, \quad (15)$$

ahol

$$0 \leq n_1 \leq n, \quad 0 \leq n_2 \leq n. \quad (16)$$

Mint hogy ω_1 és ω_2 definíciójuk értelmében mindenkor pozitívak, úgy hogy

$$o_H > o_F \text{ esetén } \omega_2 = o_H - o_F,$$

$$o_H < o_F \text{ esetén } \omega_2 = o_F - o_H,$$

az s és m számok kapcsolatát az n_1 és n_2 számokkal az

$$\left. \begin{aligned} m &= n - (n_1 + n_2), & s &= n_2 - n_1, & \text{ha } o_H > o_F, \\ m &= n_2 - n_1, & s &= n - (n_1 + n_2), & \text{ha } o_H < o_F \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

képletek adják meg (az $o_H = o_F$ esetben $\omega_2 = 0$ és a rendszer elfajult).

A keresztezett elektromos és mágneses terek általánosabb esetében *Klein*⁷ és *Lenz*⁸ eredményei értelmében a (15) kifejezés a rendszer kvantumállapotainak perturbációs energiájára érvényes marad, ha az ω_1 , ω_2 frekvenciákat a következőképpen definiáljuk. Jelöljenek most o_F és o_H a külső elektromos, ill. mágneses tér irányával párhuzamos *vektorokat*, melyek abszolútértéke megegyezik a (10), ill. (9) szekuláris frekvenciával; ezen szekuláris frekvenciák felléptét eredményezné e terek egyikének vagy másikának jelenléte egymagában. Adjuk most össze és vonjuk ki egymásból o_F -et és o_H -t vektorálisan és képezzük az így előállított vektorok abszolútértékét. Ily módon kapjuk:

$$\omega_1 = |o_H + o_F|, \quad \omega_2 = |o_H - o_F|. \quad (18)$$

Párhuzamos elektromos és mágneses terek esetén ez megegyezik a korábbi előírással.

A nyert eredménnyel kapcsolatosan komoly nehézségek merülnek fel, ha azt összefüggésbe hozzuk azon pályák kizárásával, amelyek esetében az elektron a magba zuhan vagy azt mozgása folyamán tetszőlegesen megközelíti. Az első ilyen fajta járulékos tilalom már a relativisztikus finomszerkezet Sommerfeld-féle elméletében fellépett, ahol az eltűnő k impulzusmomentum-kvantumszámhoz tartozó

állapotokat, melyekben az elektron a magon áthaladó egyenes mentén ingamozgást végezne, mint nem megfelelőket ki kellett zárni a stacionárius állapotok közül:

$$k \neq 0. \quad (19)$$

A Stark-effektus esetében a Stark-effektus kvantumszámának $|s|=n$ értéke éppen ilyen egyenesvonalú inga-pályáknak felel meg és tapasztalatilag bizonyosnak tekinthető, hogy az a valóságban nem lép fel:

$$|s| \neq n. \quad (20)$$

Bohr a gyenge tengelyszimmetrikus erőterekben fellépő relativisztikus finomszerkezet stacionárius állapotainak számát a Stark-effektus állapotszámával összehasonlítva általánosságban megmutatta, hogy a (19) járulékos tilalom folyamánként mindenkor ki kell zárni valamennyi $m=0$ pályát is:

$$m \neq 0; \quad (20')$$

egyébként ha $m=0$, a Stark-effektus esetében az elektron a magot tetszőlegesen megközelíti. A (20') a (20)-at speciális esetként magában foglalja, minthogy (13) szerint az $s=n$ esetben az m szám csak a zérus értéket veheti fel. Keresztezett terekben meg van rá a lehetőség, hogy megengedett pályákat, melyek stacionárius állapotoknak felelnek meg, folytonosan átvigyük a (20) vagy a (20') feltétel értelmében kirekesztett pályákba. Ehhez csak a következő adiabatikus folyamatot kell végrehajtunk. Legyen először a két tér párhuzamos és o_H, o_F legyenek különbözők: mondjuk legyen $o_H > o_F$. Miután a két tér irányát egymáshoz képest lassan elforgattuk, csökkentjük a mágneses tér erősségét addig, amíg $|o_H| < |o_F|$ be nem következik; végül tegyük a két teret ismét párhuzamossá. E folyamat közben (18) szerint ω_1 és ω_2 mindvégig különböznek zérustól, az n_1 és n_2 kvantumszámok ennél fogva mindvégig megtartják eredeti értéküket. Minthogy az adiabatikus folyamat előtt $o_H > o_F$, utána pedig $o_H < o_F$ áll fenn, (17) folytán a folyamat olyan állapotokat visz át egymásba, amelyek egymásból az s elektromos kvantumszám és az m mágneses kvantumszám értékeinek felcserélésével állnak elő. Speciálisan az $s=n, m=0$ inga-pálya a térre merőlegesen álló $s=0, m=n$ körpályába megy át. Azt találjuk tehát, hogy a járulékos tilalmak, melyek értelmében az egyenes inga-pályák kizárandók, a többszörösen periodikus rendszerek kvantumelméletében nem vihetők keresztül ellentmondásmentesen.

Az alábbiakban elvégzett számítás azt mutatja (5. §), hogy az új kvantummechanikában, melyben elektronpályák nem kerülnek bevezetésre a stacionárius állapotok szemléltetésére, a különleges járulékos tilalmak feleslegessé válnak és a vázolt nehézségek automatikusan kiküszöbölnődnek. A perturbálatlan atom n -kvantumos

$$E_n = -\frac{RhZ^2}{n^2} \quad (R = \text{Rydberg állandó}) \quad (21)$$

energiájú állapotához ui. párhuzamos, ill. keresztezett külső elektromos és mágneses terekben ismét a (14), ill. (15) értékű járulékos energia adódik, ahol o_H -t és o_F -et

ismét (9) és (10), ω_1 -et és ω_2 -t pedig (18) adja meg. A (13), (16) és (17) képletekben azonban az új mechanika szerint n mindenkor az

$$n^* = n - 1 \quad (22)$$

számmal helyettesítendő, mely most s, m és n_1, n_2 maximális értékének szerepét tölti be; így tehát

$$s = -(n^* - |m|), -(n^* - |m| - 2), \dots, (n^* - |m| - 2), \quad (13^*)$$

$$n^* - |m|, \quad \text{ahol} \quad |m| \leq n^*,$$

$$0 \leq n_1 \leq n^*, \quad 0 \leq n_2 \leq n^*, \quad (16^*)$$

$$\left. \begin{aligned} m &= n^* - (n_1 + n_2), & s &= n_2 - n_1, & \text{ha } o_H > o_F, \\ m &= n_2 - n_1, & s &= n^* - (n_1 + n_2), & \text{ha } o_H < o_F. \end{aligned} \right\} \quad (17^*)$$

Speciálisan a Stark-effektusra (10) és (14) alapján következik:

$$\left. \begin{aligned} E &= \frac{3}{2} e F a_1 n s, \\ 0 &\leq s \leq n^*, \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

amint azt a tapasztalat kívánja. Látjuk továbbá, hogy az m és s számok értékeinek halmaza immár teljesen szimmetrikus, amint azt a keresztezett terekkel elvégzett adiabatikus folyamat megköveteli.

Ha a perturbálatlan atom elfajulását valamely járulékos centrális erőterrel (amelyet pl. a relativisztikus korrekciók szolgáltatnak) és egy külső mágneses térrel feloldjuk, az atom n -kvantum, (21) energiájú állapota a k és m kvantumszámok segítségével osztályozható állapotokra bomlik fel; e kvantumszámok az ismert

$$\Delta k = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1$$

kiválasztási szabályoknak tesznek eleget. Az m egész szám most is, a (12) képletnek megfelelően, az atom impulzuszórájának a térrel párhuzamos összetevőjét határozza meg; a centrális tér perturbációs energiájának értékét meghatározó k szám nem rendelkezik ilyen közvetlen dinamikai jelentéssel. Az n -kvantum állapot esetében a k kvantumszám $n-1$ egymást követő értéket vesz fel, melyek egymástól egy-egy egységben különböznek, úgy hogy a finomszerkezet-szintek száma minden esetre helyesen adódik járulékos tilalmak bevezetése nélkül (energiaértékeikről még semmit sem tudunk mondani). A k kvantumszámot speciálisan úgy kívánjuk normálni, hogy külső mágneses térben az m kvantumszám minden egyes, adott n -nel és k -val jellemzett állapotban a

$$-k \leq m \leq k \quad (24)$$

egész számú értékeket vegye fel. Az így normált k szám az n -kvantum állapotban a

$$k = 0, 1, 2, \dots, n^* \quad (25)$$

értékeket veheti fel. A (24) és (25), valamint a (13)* segítségével osztályozott állapotok között egyértelmű megfeleltetés létesíthető. Az n -kvantum állapot súlya (mindegyik esetben) n^2 -tel egyenlő.

A hidrogén atom külső terekben jelentkező termjeinek megadott, az új elméletből adódó rendszere speciálisan arra az eredményre vezet, hogy ezen atom normál-

állapotában, amikor $n = 1$, $n^* = 0$, az m kvantumszám az $m = 0$ -on kívül más értéket nem vehet fel, ez az állapot tehát nem-mágneses. Ez a következtetés, szem előtt tartva az alkáli atomok viselkedésének analógiáját, alighanem idegenkedést ébreszt. Ezzel kapcsolatban hangsúlyoznunk kell, hogy az új kvantummechanika jelenlegi megfogalmazása az anomális Zeeman-effektusról (a Larmor-tétel érvényének megszűnéséről) láthatóan még nem ad számot és hogy ennél fogva még szükségesnek bizonyulhat ezen elmélet módosítása. Nem látszik kizártnak, hogy az elmélet e módosításai már az egyetlen elektronnal rendelkező atomok esetében meg fognak nyilatkozni. Ezekre a kérdésekre a dolgozat végén visszatérünk (6. §).

Ami az új elmélet valamely egyelektronos atom esetében érvényes mátrix-egyenleteinek megoldására a következőkben felhasznált módszert illeti, a most következő 3. §-ban először is az elektron Descartes-koordinátáinak x, y, z mátrixai-val (melyeket egy \mathbf{r} vektormátrixszá foglalnunk össze), a rádiuszvektor hosszának \mathbf{r} mátrixával, valamint ezek idő szerint képzett deriváltjaival végzett operációk számítási szabályait kell meghatároznunk. Az új kvantummechanika törvényeinek jelenleg ismert megfogalmazása szükségessé teszi, hogy a φ polárszög bevezetését elkerüljük. Ez ugyanis, miután nem marad véges határok között, nem állítható elő formálisan mátrix segítségével, ellentétben az előbb említett koordinátákkal, melyek a klasszikus mechanikában librációkat végeznek.

Éppen ezekből a következő, a Coulomb-erők esetében alkalmazható speciális klasszikus mechanikai integrációs módszer, melyet már Lenz⁹ felhasznált, különösen alkalmasnak bizonyul arra, hogy az új kvantummechanikába átvigyük. Jelentse

$$\mathfrak{P} = m_0[\mathbf{rv}] \quad (26)$$

az elektron időben állandó impulzusmomentumát a mag körül,

$$\mathbf{p} = m_0\mathbf{v}$$

pedig az impulzusát; ekkor a klasszikus mechanika mozgásegyenleteiből könnyen meg lehet mutatni, hogy az

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{Ze^2m_0} [\mathfrak{P}\mathbf{p}] + \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (27)$$

vektor időben állandó. Innen \mathbf{r} -rel skalárisan szorozva következik:

$$(\mathfrak{A}\mathbf{r}) = -\frac{1}{Ze^2m_0} \mathfrak{P}^2 + r. \quad (28)$$

Ez kúpszelet egyenlete, s innen látható, hogy \mathfrak{A} a magtól az ellipszis aphéliuma felé mutat, hossza pedig a numerikus excentricitással egyenlő. A (27) összefüggés két oldalát négyzetre emelve kapjuk:

$$1 - \mathfrak{A}^2 = -\frac{2E}{m_0Z^2e^4} \mathfrak{P}^2; \quad (29)$$

itt E az energia.

A 4. §-ban megmutatjuk, hogy az új mechanikában is bevezethető (27) mintájára egy időben állandó \mathfrak{A} vektormátrix, melyre az időben ugyancsak állandó \mathfrak{P} vektormátrixszal együtt (28)-hoz és (29)-hez hasonló összefüggések érvényesek. Ha

még tekintetbe vesszük az új mechanika sajátos (II) kvantumfeltételeit és a 3. §-ban nyert összefüggéseket, a mátrixegyenletek olyan rendszerére jutunk, amelyekben immár csak az időben állandó \mathfrak{H} , \mathfrak{P} és \mathbf{E} mátrixok lépnek fel, a koordináták (azaz az átmeneti valószínűségek) azonban nem. Ez utóbbi egyenletek megoldása elemi módszerekkel elvégezhető (5. §); így jutunk az itt már megbeszélt eredményekre.

3. § Számítási szabályok a rádiuszvektor mátrixára. Az impulzusmomentum-tétel centrális erők esetére. Kiindulásképpen meghatározzuk az \mathbf{r} vektormátrix komponenseit alkotó x, y, z Descartes-féle koordináta-mátrixokra, valamint a rádiuszvektor hosszának \mathbf{r} mátrixára vonatkozó számítási szabályokat. Ezek között nyilvánvalóan fenn kell állnia az

$$\mathbf{r}^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad (30)$$

összefüggésnek. A (II) kvantumszabályokban bennfoglaltatik \mathbf{x} és \mathbf{y} , \mathbf{x} és $\dot{\mathbf{y}}$, valamint $\dot{\mathbf{x}}$ és $\dot{\mathbf{y}}$ felcserélhetősége (és ugyanúgy a többi koordinátákra is):

$$xy = yx, \dots; \quad \dot{x}\dot{y} = \dot{y}\dot{x}, \dots; \quad \dot{x}\dot{y} = \dot{y}\dot{x}, \dots; \quad (31a)$$

valamint a

$$p_x x - x p_x = \frac{h}{2\pi i} 1, \dots \quad (31b)$$

összefüggések ($p_x = m\dot{x}$ az impulzus p_x, p_y, p_z komponensekkel rendelkező $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ vektormátrixának x -komponense). Itt és a következőkben ... mindenkor a többi koordinátára vonatkozó analóg egyenleteket jelez, melyek a kiírt egyenletből a koordináták ciklikus felcserélésével nyerhetők.

Tekintetbe véve az \mathbf{r} mátrixot is, ezek a szabályok még a következő összefüggésekkel egészíthetők ki. Először is \mathbf{r} ugyancsak felcserélhető az x, y, z mátrixokkal; vektoralakban írva:

$$\mathbf{r}\mathbf{r} = \mathbf{r}\mathbf{r}. \quad (32)$$

Másodszor \mathbf{r}, x, y, z tetszőleges \mathbf{f} racionális függvényére fennáll a

$$p_x \mathbf{f} - \mathbf{f} p_x = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} \quad (33)$$

összefüggés. Speciálisan az $\mathbf{f} = \mathbf{r}$ esetben kapjuk:

$$p\mathbf{r} - \mathbf{r}p = \frac{h}{2\pi i} \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (34)$$

Megfordítva, (31)-ből és (34)-ből általánosságban következik (33) minden, az x, y, z és \mathbf{r} pozitív és negatív hatványai szerint haladó sor alakjában előállítható függvényre; ezt teljes indukcióval könnyű megmutatni. A kapott (34) összefüggés (30)-cal is összhangban van. A (32) és (33) összefüggéseket szükségszerűen meg kell követelnünk ahhoz, hogy az

$$\frac{m}{2} \mathbf{v}^2 + \mathbf{F}(x, y, z, \mathbf{r}) = \mathbf{E} \quad (\text{átlós mátrix}) \quad (35)$$

energiatételből (itt az egyszerűség kedvéért egyetlen részecske jelenlétét feltételezzük) és a frekvenciafeltételből, melyből bármely Φ mennyiségre következik az

$$\mathbf{E}\Phi - \Phi\mathbf{E} = \frac{h}{2\pi i} \dot{\Phi}$$

egyenlet fennállása, kiadódjanak a

$$\frac{d\mathbf{p}_x}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}}, \dots \quad (36)$$

mozgásegyenletek. Itt tehát posztuláljuk a (30), (32), (34) összefüggéseket kielégítő \mathbf{r} mátrix létezését.

Vezessük be most a \mathfrak{P} vektormátrixot, mely a részecske kezdőpontra vonatkoztatott impulzusmomentumának felel meg. Mindenek előtt jegyezzük meg, hogy a következőkben két vektormátrix, \mathfrak{A} és \mathfrak{B} skalárszorzatán, ugyanúgy mint a szokásos vektorszámításban, az

$$(\mathfrak{A}\mathfrak{B}) = \mathfrak{A}_x\mathfrak{B}_x + \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_y + \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_z$$

kifejezést, $[\mathfrak{A}\mathfrak{B}]$ vektorszorzatukon pedig az

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{B}]_x = \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_z - \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_y, \dots \quad (37)$$

komponensekkel rendelkező új vektormátrixot értjük. Itt általában ügyelnünk kell arra, hogy milyen sorrendben szorozzuk össze \mathfrak{A} -t és \mathfrak{B} -t: Az $(\mathfrak{A}\mathfrak{B}) - (\mathfrak{B}\mathfrak{A})$ és $[\mathfrak{A}\mathfrak{B}] + [\mathfrak{B}\mathfrak{A}]$ kifejezések itt általában a szorzás kommutatív törvényének érvénytelensége folytán nem tűnnek el, és valamely \mathfrak{A} vektormátrix önmagával képezett $[\mathfrak{A}\mathfrak{A}]$ vektorszorzata, melynek komponensei

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{A}]_x = \mathfrak{A}_y\mathfrak{A}_z - \mathfrak{A}_z\mathfrak{A}_y, \dots, \quad (37')$$

általában ugyancsak különbözik zérustól. Ha azonban speciálisan az $[\mathbf{rv}]$ vektorszorzatot képezzük, úgy ez \mathbf{x} és $\dot{\mathbf{y}}$ felcserélhetősége folytán megegyezik $-\mathbf{[vr]}$ -rel, és a részecske impulzusmomentumának vektormátrixa a

$$\mathfrak{P} = m[\mathbf{rv}] = -m[\mathbf{vr}] \quad (38)$$

képlettel definiálható.

Ez a következő felcserélési szabályoknak tesz eleget, melyek a (31a) és (31b) összefüggésekből közvetlenül következnek:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{xP}_x &= \mathbf{P}_x\mathbf{x}, \dots; & \mathbf{xP}_y - \mathbf{P}_y\mathbf{x} &= \mathbf{P}_x\mathbf{y} - \mathbf{yP}_x = -\frac{h}{2\pi i}\mathbf{z}, \dots; \\ (\mathbf{rP}) &= (\mathbf{Pr}) = 0; \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

hasonlóképpen

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{p}_x\mathbf{P}_x &= \mathbf{P}_x\mathbf{p}_x, \dots; \\ \mathbf{p}_x\mathbf{P}_y - \mathbf{P}_y\mathbf{p}_x &= \mathbf{P}_x\mathbf{p}_y - \mathbf{p}_y\mathbf{P}_x = -\frac{h}{2\pi i}\mathbf{p}_z, \dots; \\ (\mathbf{pP}) &= (\mathbf{pP}) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

Innen következik továbbá, hogy $\mathbf{v}^2 = \dot{\mathbf{x}}^2 + \dot{\mathbf{y}}^2 + \dot{\mathbf{z}}^2$ a $\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z$ mátrixokkal felcserélhető:¹⁰

$$\mathbf{v}^2 \mathfrak{P} = \mathfrak{P} \mathbf{v}^2, \quad (41)$$

(34)-ből pedig \mathbf{r} felcserélhetősége következik a $\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z$ komponensekkel; így tehát \mathfrak{P} bármely, csak \mathbf{r} -től függő $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ függvénnyel ugyancsak felcserélhető. Ha tehát centrális erővel van dolgunk, mikor is a potenciális energia egyedül \mathbf{r} -től függ:

$$\frac{m}{2} \mathbf{v}^2 + \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{E} \quad (\text{átlós mátrix}), \quad (35')$$

a fentiek szerint

$$\mathbf{E} \mathfrak{P} = \mathfrak{P} \mathbf{E},$$

ami azt jelenti, hogy a \mathfrak{P} vektormátrix időben konstans (impulzusmomentum-integrál).

A \mathfrak{P} vektormátrix önmagával képezett vektorszorzatára [vö. (37')] könnyen adódik a később felhasználandó

$$[\mathfrak{P} \mathfrak{P}] = -\frac{h}{2\pi i} \mathfrak{P} \quad (43)$$

összefüggés. Pl. $[\mathfrak{P} \mathfrak{P}]$ z-komponensére (39) és (40) felhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_x \mathbf{P}_y - \mathbf{P}_y \mathbf{P}_x &= \mathbf{P}_x (\mathbf{z} \mathbf{p}_x - \mathbf{x} \mathbf{p}_z) - (\mathbf{z} \mathbf{p}_x - \mathbf{x} \mathbf{p}_z) \mathbf{P}_x \\ &= (\mathbf{P}_x \mathbf{z} - \mathbf{z} \mathbf{P}_x) \mathbf{p}_x - \mathbf{x} (\mathbf{P}_x \mathbf{p}_z - \mathbf{p}_z \mathbf{P}_x) \\ &= \frac{h}{2\pi i} (\mathbf{y} \mathbf{p}_x - \mathbf{x} \mathbf{p}_y) = -\frac{h}{2\pi i} \mathbf{P}_z. \end{aligned}$$

Kiszámíthatjuk a

$$\mathbf{p}_r = m \dot{\mathbf{r}}$$

radiális impulzust is. Erre fennáll:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_r &= \frac{2\pi i}{h} m (\mathbf{E} \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{E}) = \frac{2\pi i}{h} \frac{1}{2} [(\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2) \mathbf{r} - \mathbf{r} (\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2)] \\ &= \frac{2\pi i}{h} \frac{1}{2} [\mathbf{p}_x (\mathbf{p}_x \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_x) + \mathbf{p}_y (\mathbf{p}_y \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_y) + \mathbf{p}_z (\mathbf{p}_z \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_z) + \\ &\quad + (\mathbf{p}_x \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_x) \mathbf{p}_x + (\mathbf{p}_y \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_y) \mathbf{p}_y + (\mathbf{p}_z \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_z) \mathbf{p}_z], \end{aligned}$$

tekintettel (34)-re kapjuk tehát:

$$\mathbf{p}_r = \frac{1}{2} \left[\left(\mathbf{p} \frac{\mathbf{r}}{r} \right) + \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \mathbf{p} \right) \right]. \quad (44)$$

Míthogy (33) szerint

$$\left(\mathbf{p} \frac{\mathbf{r}}{r} \right) - \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \mathbf{p} \right) = \frac{h}{2\pi i} \operatorname{div} \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{h}{2\pi i} \frac{2}{r},$$

(44) így is írható:

$$\mathbf{p}_r = (\mathbf{p}\mathbf{r}) \frac{1}{r} - \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{r} = \frac{1}{r} (\mathbf{r}\mathbf{p}) + \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{r}. \quad (44')$$

Szorozva \mathbf{r} -rel először is a

$$\mathbf{p}_r \mathbf{r} + \mathbf{r} \mathbf{p}_r = (\mathbf{p}\mathbf{r}) + (\mathbf{r}\mathbf{p}) \quad (45)$$

összefüggést kapjuk, mely közvetlenül (30)-ból is megkapható, ha azt az idő szerint differenciáljuk, továbbá kapjuk:

$$\mathbf{p}_r \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_r = (\mathbf{p}\mathbf{r}) - (\mathbf{r}\mathbf{p}) - \frac{h}{2\pi i} 2.$$

A $(\mathbf{p}\mathbf{r}) - (\mathbf{r}\mathbf{p})$ kifejezés jelentése:

$$(\mathbf{p}_x \mathbf{x} - \mathbf{x} \mathbf{p}_x) + (\mathbf{p}_y \mathbf{y} - \mathbf{y} \mathbf{p}_y) + (\mathbf{p}_z \mathbf{z} - \mathbf{z} \mathbf{p}_z)$$

s itt a zárójelbe foglalt kifejezések mindegyikének értéke (31b) szerint

$$\frac{h}{2\pi i} 1.$$

Végeredményként kapjuk tehát:

$$\mathbf{p}_r \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{p}_r = \frac{h}{2\pi i} 1. \quad (46)$$

Végül későbbi felhasználás céljára kiszámítjuk még $\frac{\mathbf{r}}{r}$ idő szerint képezett deriváltját. A x -komponensre pl. (34) felhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\mathbf{x}}{r} &= \frac{2\pi i}{h} \left(\mathbf{E} \frac{\mathbf{x}}{r} - \frac{\mathbf{x}}{r} \mathbf{E} \right) = \frac{2\pi i}{h} \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}^2 \frac{\mathbf{x}}{r} - \frac{\mathbf{x}}{r} \mathbf{p}^2 \right) \\ &= \frac{2\pi i}{h} \frac{1}{2m} \left\{ \mathbf{p} \left(\mathbf{p} \frac{\mathbf{x}}{r} - \frac{\mathbf{x}}{r} \mathbf{p} \right) + \left(\mathbf{p} \frac{\mathbf{x}}{r} - \frac{\mathbf{x}}{r} \mathbf{p} \right) \mathbf{p} \right\} \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ \left(\mathbf{p}_x \frac{y^2 + z^2}{r^3} - \mathbf{p}_y \frac{xy}{r^3} - \mathbf{p}_z \frac{xz}{r^3} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{y^2 + z^2}{r^3} \mathbf{p}_x - \frac{xy}{r^3} \mathbf{p}_y - \frac{xz}{r^3} \mathbf{p}_z \right) \right\} \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ \left(\mathbf{p}_y \frac{z}{r^3} - \mathbf{p}_z \frac{y}{r^3} \right) + \left(\frac{z}{r^3} \mathbf{p}_y - \frac{y}{r^3} \mathbf{p}_z \right) \right\}. \end{aligned}$$

Általánosságban írható tehát:

$$\frac{d}{dt} \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{1}{2m} \left\{ \left[\mathbf{p} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right] - \left[\frac{\mathbf{r}}{r^3} \mathbf{p} \right] \right\}. \quad (47)$$

4. § Az időben állandó \mathfrak{A} vektormátrix bevezetése a Coulomb-erő esetében. A koordináták kiküszöbölése. Térjünk rá most az egyetlen m_0 tömegű és $-e$ töltésű elektront tartalmazó atom tárgyalására, melyben az elektrorra a $+Ze$ töltésű rögzített mag által kifejtett Coulomb-féle vonzóerő hat. A Hamilton-függvényt most az

$$\frac{1}{2m_0} \mathbf{p}^2 - \frac{Ze^2}{r} = E \quad (\text{átlós mátrix}) \quad (48)$$

alakban kell felvennünk, azaz (35')-ben az

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r^3} \mathbf{r}$$

speciális választással kell élnünk. Az energiatételből a kvantumszabályok segítségével levezethető (36) mozgásegyenletek itt a klasszikus mechanikával analógiában a

$$\dot{\mathbf{p}} = m_0 \ddot{\mathbf{r}} = -\frac{Ze^2}{r^3} \mathbf{r} \quad (49)$$

alakúak. Ennélfogva (47) alapján a klasszikus mechanikával analógiában következik [vö. (27)], hogy az

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{Ze^2 m_0} \frac{1}{2} \{[\mathfrak{P}\mathbf{p}] - [\mathbf{p}\mathfrak{P}]\} + \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (50)$$

képlettel definiált \mathfrak{A} vektormátrix a Coulomb-erőtér speciális esetében az időben állandó. A (40) összefüggések alapján

$$\begin{aligned} \mathfrak{A} &= \frac{1}{Ze^2 m_0} \left\{ [\mathfrak{P}\mathbf{p}] + \frac{h}{2\pi i} \mathbf{p} \right\} + \frac{\mathbf{r}}{r} \\ &= -\frac{1}{Ze^2 m_0} \left\{ [\mathbf{p}\mathfrak{P}] + \frac{h}{2\pi i} \mathbf{p} \right\} + \frac{\mathbf{r}}{r} \end{aligned} \quad (51')$$

is írható.

A további számítások az előző §-ban összeállított szabályokat segítségül hívva egészen elemi úton elvégezhetők. Először is a kúpszelet-pálya (28) klasszikus egyenletéhez hasonló módon nyerjük az

$$\frac{1}{2} [(\mathfrak{A}\mathbf{r}) + (\mathbf{r}\mathfrak{A})] = -\frac{1}{Ze^2 m_0} \left[\mathfrak{P}^2 + \frac{3}{2} \frac{h^2}{4\pi^2} \right] + \mathbf{r} \quad (51)$$

összefüggést, továbbá az

$$\frac{1}{2} ([\mathfrak{A}\mathbf{r}] + [\mathbf{r}\mathfrak{A}]) = -\frac{h}{2\pi i} \frac{3}{2} \frac{1}{Ze^2 m_0} \mathfrak{P} \quad (52)$$

felcserélési szabályt.

Meg lehet győződni továbbá a következő összefüggések érvényességéről, melyekben az x, y, z, r koordináták egyáltalán nem szerepelnek és amelyekben csakis az időben állandó $\mathfrak{A}, \mathfrak{P}$ és \mathbf{E} mátrixok lépnek fel:

$$[\mathfrak{P}\mathfrak{P}] = -\frac{h}{2\pi i}\mathfrak{P}; \quad (\text{I})$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A}_x \mathbf{P}_x &= \mathbf{P}_x \mathbf{A}_x, \dots; \\ \mathbf{A}_x \mathbf{P}_y - \mathbf{P}_y \mathbf{A}_x &= \mathbf{P}_x \mathbf{A}_y - \mathbf{A}_y \mathbf{P}_x = -\frac{h}{2\pi i} \mathbf{A}_z, \dots; \\ (\mathfrak{A}\mathfrak{P}) &= (\mathfrak{P}\mathfrak{A}) = 0; \end{aligned} \right\} \quad (\text{II})$$

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{A}] = \frac{h}{2\pi i} \frac{2}{m_0 Z^2 e^4} \mathbf{E} \mathfrak{P}; \quad (\text{III})$$

$$1 - \mathfrak{A}^2 = -\frac{2}{m_0 Z^2 e^4} \mathbf{E} \left(\mathfrak{P}^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right). \quad (\text{IV})$$

Az (I) egyenlet azonos az előző szakasz (43) egyenletével, (II) szerkezete hasonló a (39) összefüggésekéhez, (IV) a klasszikus mechanika (29) egyenletével mutat analógiát, a $\frac{h^2}{4\pi^2}$ tag fellépte [ugyanígy a $\frac{3}{2} \frac{h^2}{4\pi^2}$ tagé (51)-ben] azonban az új mechanikára jellemző.

Az \mathfrak{A} időben állandó vektormátrix létezéséből arra következtethetünk, hogy az egyetlen elektront tartalmazó atom (akárcsak a klasszikus mechanikában a Kepler-probléma), még ha az atom térbeli orientációjától el is tekintünk, elfajult rendszert képez. A levezetett összefüggésekből könnyen levonható a következtetés, hogy $\mathfrak{A}\mathfrak{P}^2 - \mathfrak{P}^2\mathfrak{A}$ általában nem tűnhet el; minthogy másrésről $\mathfrak{A}\mathbf{E} - \mathbf{E}\mathfrak{A}$ eltűnik, az \mathbf{E} energia meghatározott értékéhez \mathfrak{P} -nek nem csak egy értéke tartozhat, a rendszer tehát valóban elfajult.

Ha ilyen rendszerrel állunk szemben, úgy az új kvantummechanikában — amint azt Born, Jordan és Heisenberg részletesen kifejtették¹² — a különböző parciális rezgések adott energiaértékkel jellemzett állapotokat összekötő átmeneteihez rendelt amplitúdói a kvantummechanikai egyenletekből nem határozhatók meg egyértelműen; az időben állandó mátrixoknak sem kell általában átlós mátrixoknak lenniök, minthogy elemeik zérustól különbözők lehetnek, olyan (n, m) helyeken amelyeknek eltűnő frekvencia felel meg: $\nu_m^n = \frac{1}{h} (E_n - E_m) = 0$. Esetünkben minden energiaértékhez (a főkvantumszám minden értékéhez) képezhető az a mátrix, amely valamely mennyiség (pl. x vagy r) időben állandó részeit tartalmazza és amelynek foka (a sorok vagy az oszlopok száma) megegyezik a szóban forgó állapot súlyával. Ezt a mátrixot, mely az eredeti mátrixból oly módon áll elő, hogy azokon a helyeken, amelyek az energiaérték megváltozásától kísért átmenetnek felelnek meg, minden mátrixelemet zérussal helyettesítünk, a szóban forgó mennyiség időbeli középértékének nevezzük és jelölésére felülvonást alkalmazunk (pl. \bar{x} és \bar{r}).

Ha az elfajult rendszerek esetében valamely kinematikai mennyiség azonos ν_m^n frekvenciához tartozó parciális rezgései nincsenek is egyértelműen lerögzítve,

ezen állapotok energiaértékei és statisztikus súlyai azonban egyértelműen meghatározottak.¹³ Ennélfogva elvben lehetségesnek kellene lennie az (I–IV) egyenletekből a megoldás fajtájára vonatkozó speciális feltevések nélkül a Balmer-termeket és a megfelelő statisztikus súlyokat levezetni. Ez azonban sajnos nem sikerült nekünk, és a következőkben más úton indulunk el ezen egyenletek megoldásainak meghatározására, amennyiben (különbféle módokon) járulékos feltételeket vezetünk be, melyek az (I–IV) egyenletek megoldásait egyértelművé teszik.

Ha ugyanis az elfajulást valamely járulékos perturbáló térrel, amelynek a H_1 Hamilton-függvény felel meg, feloldjuk, úgy amint azt a Born, Heisenberg és Jordan¹⁴ nyomán elvégzett perturbációszámítás mutatja, a perturbáló Hamilton-függvény perturbálatlan mozgásra képzett H_1 időbeli középértékének átlós mátrixnak kell lennie. Esetünkben ez a középérték általában a perturbálatlan mozgás E energiáján kívül még \mathfrak{P} -től és \mathfrak{A} -tól fog függni.

Ha a perturbáló tér speciálisan a Coulomb-félétől eltérő járulékos centrális erő, úgy ennek középértéke (E -n kívül csak) \mathfrak{P}^2 -től fog függeni, minthogy itt semmilyen térirány nincs kitüntetve. Valamely z -irányú mágneses tér perturbáló energiája továbbá csak az impulzusmomentumnak a térrel párhuzamos P_z komponensétől függ. Eszerint azt a követelményt támasztva, hogy \mathfrak{P}^2 és P_z átlós mátrix legyen, az (I–IV) egyenletek egy speciális megoldását nyerjük, mely alkalmas a relativisztikus finomszerkezet és egy járulékos gyenge mágneses tér tekintetbe vételére. Először ezt az esetet tárgyaljuk a következő §-ban.

Egy másik különösen érdekes eset a Stark-effektus esete. Itt azt kell megkövetelnünk, hogy a pálya elektromos középpontját előállító időben állandó $\bar{\mathbf{r}}$ vektormátrixnak a tér irányába (a z -irányba) eső \bar{z} komponense átlós mátrix legyen. Meg lehet mármost mutatni, hogy ez az $\bar{\mathbf{r}}$ mátrix \mathfrak{A} -val ugyanúgy függ össze, mint a klasszikus elméletben, nevezetesen fennáll az

$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{3}{2} \frac{Ze^2}{2|E|} \mathfrak{A} \quad (53)$$

összefüggés (a klasszikus elméletben $\frac{Ze^2}{2|E|}$ a Kepler-ellipszis a nagytengelyét adja meg). Először is $\bar{\mathbf{r}}$ -re és \mathfrak{P} -re (39) és (II) szerint ugyanolyan felcserélési összefüggések érvényesek, mint \mathfrak{A} -ra és \mathfrak{P} -re. Ha továbbá (52)-t és (III)-at összehasonlítjuk, úgy az $\bar{\mathbf{r}} - \frac{3}{2} \frac{Ze^2}{2|E|} \mathfrak{A}$ különbségre ezen kívül az $\left[\mathfrak{A}, \bar{\mathbf{r}} - \frac{3}{2} \frac{Ze^2}{2|E|} \mathfrak{A} \right] = 0$ összefüggéseket kapjuk. Amint azt az (I–IV) egyenleteknek a következő §-ban leszámaztatott megoldásaik alapján elvégzett részletes diszkussziója mutatja, ez elegendő számú lineáris egyenletet szolgáltat ahhoz, hogy $\bar{\mathbf{r}} - \frac{3}{2} \frac{Ze^2}{2|E|} \mathfrak{A}$ eltűnésére következtessünk. Ha a z -irányú elektromos térhez hozzávesszünk egy azonos irányú mágneses teret, úgy ezt az esetet (53) alapján azzal a követelménnyel is jellemezhetjük, hogy A_z és P_z átlós mátrixok legyenek.

Végül a következő §§-ban utolsóként megadjuk még a keresztezett elektromos és mágneses terek esetének tárgyalását, mely, mint azt 2. §-ban részletesen kifejtettük, tekintettel a szingularis mozgásokra vonatkozóan az eddigi elméletben fellépett járulékos tilalmakra, különleges érdeklődésre tart számot.

5. § Az (I–IV) egyenletek megoldása. A Balmer-termek levezetése.

a) \mathbf{P}_z és \mathfrak{P}^2 átlós mátrixok.

Ebben az először tárgyalásra kerülő esetben, mely az elfajulás járulékos centrális tér és gyenge z-irányú mágneses tér segítségével előidézett feloldásának felel meg, mindenek előtt az (I) és (II) egyenleteket elégítjük ki. Adott \mathfrak{P}^2 mellett \mathbf{P}_z lehetséges értékei legyenek

$$\mathbf{P}_{z\,k,m}^{k,m} = m \frac{h}{2\pi}, \quad (54)$$

ahol az m szám $-k$ -tól $+k$ -ig fut:

$$-k \leq m \leq k. \quad (54')$$

Legyenek továbbá \mathfrak{P} azon parciális rezgései, amelyek m egy egységnyi változásának felelnek meg, balra és jobbra cirkulárpolarizáltak az (x, y) síkban:

$$P_{y\,k,m\pm 1}^{k,m} = \pm i P_{x\,k,m\pm 1}^{k,m}. \quad (55)$$

Az (I) összefüggésből ekkor következik:

$$\begin{aligned} |P_{x\,k,m\mp 1}^{k,m}|^2 &= |P_{y\,k,m\mp 1}^{k,m}|^2 = \frac{1}{4} \frac{h^2}{4\pi^2} [k(k+1) - m(m\mp 1)] \\ &= \frac{1}{4} \frac{h^2}{4\pi^2} (k\pm m)(k+1\mp m), \end{aligned} \quad (56)$$

$$(\mathfrak{P}^2)_{k,m}^{k,m} = \frac{h^2}{4\pi^2} k(k+1). \quad (57)$$

Az \mathfrak{A} mátrixra a Zeeman-komponensek Hönl–Kronig-féle intenzitásképleteinek megfelelően írható továbbá:

$$A_{y\,k',m\pm 1}^{k,m} = \pm i A_{x\,k',m\pm 1}^{k,m} \quad (k' = k+1 \text{ vagy } k-1), \quad (58)$$

$$|A_{x\,k,m\pm 1}^{k+1,m}|^2 = |A_{y\,k,m\pm 1}^{k+1,m}|^2 = \frac{1}{4} C_{k+1}^{k+1} (k\mp m)(k\mp m+1); \quad (59)$$

ha itt m -et $m-1$ -gyel, ill. $m+1$ -gyel helyettesítjük, úgy következik még:

$$\begin{aligned} |A_{x\,k+1,m\pm 1}^{k,m}|^2 &= |A_{y\,k+1,m\pm 1}^{k,m}|^2 \\ &= \frac{1}{4} C_{k+1}^{k+1} (k\pm m+1)(k\pm m+2); \end{aligned} \quad (59a)$$

végül \mathbf{A}_z -re fennáll:

$$|A_{z\,k,m}^{k+1,m}|^2 = C_{k+1}^{k+1} [(k+1)^2 - m^2]. \quad (60)$$

Itt még nyitott kérdés marad, vajon m (és így k is) feles szám-e vagy egész, továbbá a C_{k+1}^{k+1} együtthatók k -nak egyelőre meghatározatlan függvényei maradnak, melyek negatív értékeket sohasem vehetnek fel és a

$$C_{k+1}^{k+1} = C_{k+1}^k$$

szimmetriaösszefüggésnek tesznek eleget. Ami \mathfrak{A} -nak \mathfrak{P} -hez viszonyított előjelet illeti, meg kell jegyeznünk, hogy amennyiben \mathbf{P}_x -et és \mathbf{A}_z -t pozitív valósnak választ-

juk, A_x pozitív vagy negatív valósnak választandó aszerint, hogy k és m ellentétes értelmű [mint $A_{x\ k+1, m-1}$ és $A_{x\ k-1, m+1}$ esetében] vagy azonos értelmű [mint $A_{x\ k+1, m+1}$ és $A_{x\ k-1, m-1}$ esetében] megváltozását eredményező átmenetekkel van-e dolgunk. Ezen feltevések mellett, mint azt a számítás mutatja, az előző § (I) és (II) egyenletei kielégülnek. Emellett Born, Heisenberg és Jordan¹⁵ megfontolásaiból kiviláglik, hogy megfordítva is, azon feltevés alapján, amely szerint \mathfrak{P}^2 és \mathbf{P}_z átlós mátrixok, \mathfrak{A} és \mathfrak{P} itt feltételezett kifejezései szükségszerűen következnek az (I) és (II) egyenletekből.

Az m és k számok normálása, valamint a C_{k+1}^k függvény meghatározása céljából folyamodjunk az előző § (III) egyenletéhez. Elegendő, ha ennek z -komponensére hivatkozunk:

$$A_x A_y - A_y A_x = \frac{h}{2\pi i} \frac{2}{m_0 Z^2 e^4} \mathbf{E} \mathbf{P}_z. \quad (62)$$

A

$$\mathbf{P}_y (A_x A_y - A_y A_x) - (A_x A_y - A_y A_x) \mathbf{P}_y = \frac{h}{2\pi i} \frac{2}{m_0 Z^2 e^4} \mathbf{E} (\mathbf{P}_y \mathbf{P}_z - \mathbf{P}_z \mathbf{P}_y)$$

kifejezést képezve (I) és (II) felhasználásával a (III) összefüggés x -komponensével megegyező egyenletre jutunk.

Képezzünk a (62) egyenlet főátlójának k, m helyén álló elemét; (58) és (59) alapján a baloldalra kapjuk:

$$\begin{aligned} (A_x A_y - A_y A_x)_{k, m}^{k, m} &= 2i \{ |A_{x\ k+1, m-1}^{k, m}|^2 - |A_{x\ k+1, m+1}^{k, m}|^2 + |A_{x\ k-1, m-1}^{k, m}|^2 - |A_{x\ k-1, m+1}^{k, m}|^2 \} = \\ &= im \{ -(2k+3)C_{k+1}^{k+1} + (2k-1)C_{k-1}^k \}. \end{aligned}$$

Ha még tekintetbe vesszük, hogy \mathbf{E} előjele negatív és bevezetjük az

$$R = \frac{2\pi^2 e^4 m_0}{h^3} \quad (63)$$

Rydberg-állandót, \mathbf{P}_z -t pedig (54) alatt megadott értékével helyettesítjük, (62)-ből az

$$m \{ -(2k+3)C_{k+1}^{k+1} + (2k-1)C_{k-1}^k \} = \frac{|E|}{RhZ^2} m. \quad (64)$$

Vegyük először szemügyre k legkisebb értékét, mely adott $|E|$ mellett lehetséges. Ekkor a $k \rightarrow k-1$ átmenet járuléka a bal oldalon nyilván nem lép fel, ennél fogva m együtthatója a bal oldalon bizonyosan nem pozitív, ugyanakkor a jobb oldalon m együtthatója pozitív. A (64) egyenlet ennél fogva k minimális értékére csak akkor elégíthető ki, ha $m=0$. Ez azonban (54) folytán azt jelenti, hogy k minimális értéke maga is eltűnik, hiszen különben m még más értékeket is felvehet. Ennek folytán k és m szükségképpen egész értékek és k -ra írható:

$$k = 0, 1, 2, \dots, n^*, \quad (65)$$

ahol n^* a k szám maximális értékét jelenti, melyet az adott $|E|$ mellett felvehet.

Ennek alapján (64)-ből következik:

$$(2k-1)C_{k-1}^k - (2k+3)C_k^{k+1} = \frac{|E|}{RhZ^2}, \quad \text{ha } k = 1, \dots, n^*, \quad (64')$$

és itt

$$C_{n^*+1}^{n^*+1} = 0 \quad (64'')$$

írandó, minthogy $k = n^*$ esetén a $k+1 \rightarrow k$ átmenet járuléka (a második tag) nyilvánvalóan nem lép fel. Kiindulva a $k = n^*$ értékből és k értéket rendre eggyel-eggyel csökkentve (64')-ből szukcesszive kiszámíthatjuk a

$$C_{n^*-1}^{n^*}, C_{n^*-2}^{n^*-1}, \dots, C_0^1$$

értékeket. Az eredmény összefoglalható a

$$C_k^{k+1} = \frac{|E|}{RhZ^2} \frac{n^*(n^*+2) - k(k+2)}{(2k+1)(2k+3)} = \frac{|E|}{RhZ^2} \frac{(n^*-k)(n^*+k+2)}{(2k+1)(2k+3)} \quad (66)$$

képletbe, melyből k -t $k-1$ -gyel helyettesítve még

$$C_{k-1}^k = \frac{|E|}{RhZ^2} \frac{n^*(n^*+2) - (k-1)(k+1)}{(2k-1)(2k+1)} = \frac{|E|}{RhZ^2} \frac{(n^*-k+1)(n^*+k+1)}{(2k-1)(2k+1)} \quad (66')$$

fennállására következtethetünk. Ezen képletek felhasználásával közvetlenül igazolható, hogy a (64'), (64'') összefüggések teljesülnek.

Végül magának az energia értékének meghatározása céljából használjuk fel még a (IV) egyenletet. Először is számítsuk ki \mathfrak{A}^2 értékét a főátló k, m helyén. Tekintetbe véve (59)-et és (60)-at, az

$$\begin{aligned} (\mathfrak{A}^2)_{k,m}^{k,m} &= 2|A_{x\ k+1, m+1}^{k,m}|^2 + 2|A_{x\ k+1, m-1}^{k,m}|^2 + |A_{z\ k+1, m}^{k,m}|^2 + \\ &+ 2|A_{x\ k-1, m+1}^{k,m}|^2 + 2|A_{x\ k-1, m-1}^{k,m}|^2 + |A_{z\ k-1, m}^{k,m}|^2 = \\ &= (k+1)(2k+3)C_k^{k+1} + k(2k-1)C_{k-1}^k, \end{aligned}$$

majd behelyettesítve a (66), (66') kifejezéseket, az

$$(\mathfrak{A}^2)_{k,m}^{k,m} = \frac{|E|}{RhZ^2} [n^{*2} + 2n^* - k(k+1)] \quad (67)$$

kifejezést kapjuk.

Most \mathfrak{A}^2 -nek ezt a kifejezését és a \mathfrak{B}^2 -et megadó (57) kifejezést kell (IV)-be behelyettesítenünk. Kapjuk:

$$1 = \frac{|E|}{RhZ^2} (n^{*2} + 2n^* + 1) = \frac{|E|}{RhZ^2} (n^* + 1)^2,$$

tehát

$$|E| = \frac{RhZ^2}{(n^* + 1)^2} = \frac{RhZ^2}{n^2} \quad (68)$$

(itt $n = n^* + 1$ -et írtunk), mint azt a 2. §-ban közöltük. Ezzel megmutattuk, hogy a Balmer-termek helyesen adódnak az új kvantummechanikából, és az n -kvantum állapothoz az új elméletben az n^2 súly tartozik.

b) A_z és P_z átlós mátrixok (Stark-effektus). Ha a z -irányban ható F erősségű homogén elektromos tér van jelen, úgy a perturbációs energia időbeli középértékét (53) alapján

$$E_1 = \frac{3}{2} eF\bar{z} = \frac{3}{2} eF \frac{Ze^2}{2|E|} A_z \quad (69)$$

adja meg. Ennek folytán ebben az esetben az (I–IV) egyenletek olyan megoldására van szükségünk, amelyhez átlós alakú A_z mátrix tartozik. Ha még ezen kívül azt a követelményt támasztjuk, hogy P_z is átlós mátrix legyen, úgy ez fizikailag azt jelenti, hogy a Stark-effektus szekuláris elfajulását gondolatban az elektromos térrel párhuzamos járulékos mágneses térrel oldjuk fel.

Itt megelégszünk az eredmény közlésével; a számításokat nem végezzük el részletesen, és mellőzzük annak bizonyítását, hogy az (I–IV) egyenletek között megoldása az egyetlen, mely a támasztott követelménynek, miszerint A_z és P_z átlós mátrixok legyenek, eleget tesz. A perturbálatlan energia valamely meghatározott, (68)-cal megadott értékéhez tartozó állapotok két kvantumszám, s és m segítségével osztályozhatók; ezek egyike (és az E_1 perturbációs energia) értékét határozza meg az

$$A_{z \, s, m} = \frac{s}{n}, \quad E_1 = \frac{3}{2} eFa_1ns \quad (0 \leq s \leq n^*)$$

$$\left(a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 Ze^2 m_0} \right) \quad (70)$$

képleten keresztül, másika pedig

$$P_{z \, s, m} = m \frac{h}{2\pi} \quad (71)$$

értelmében P_z értékét adja meg. Az s és m kvantumszámok értékeinek halmazát már megadtuk a 2. §-ban a (13*) összefüggéssel. A P_x, P_y, A_x, A_z mátrixoknak csak olyan átmenetekhez tartozó elemei különböznek zérustól, amelyekben s és m megváltozása ± 1 -gyel egyenlő. A mátrixelemek értékét a következő képletek adják meg:

$$P_{y \, s', m \pm 1} = \pm i P_{x \, s', m \pm 1}, \quad A_{y \, s', m \pm 1} = \pm i A_{x \, s', m \pm 1} \quad (72)$$

$$(s' = s + 1 \quad \text{vagy} \quad s - 1),$$

$$A_{x \, s \pm 1, m \pm 1} = + \frac{2\pi}{h} \frac{1}{n} P_{x \, s \pm 1, m \pm 1}, \quad (73)$$

$$A_{x \, s \mp 1, m \pm 1} = - \frac{2\pi}{h} \frac{1}{n} P_{x \, s \mp 1, m \pm 1}$$

(az utóbbi összefüggésekben vagy mindenütt a felső, vagy mindenütt az alsó előjelet kell venni),

$$\begin{aligned} |P_{x\ s-1, m-1}^{s, m}|^2 &= |P_{y\ s-1, m-1}^{s, m}|^2 \\ &= \frac{1}{16} \frac{h^2}{4\pi^2} [n^* + 2 - (m+s)][n^* + (m+s)], \end{aligned} \quad (74)$$

$$\begin{aligned} |P_{x\ s+1, m-1}^{s, m}|^2 &= |P_{y\ s+1, m-1}^{s, m}|^2 \\ &= \frac{1}{16} \frac{h^2}{4\pi^2} [n^* + 2 - (m-s)][n^* + (m-s)]. \end{aligned}$$

Könnyen utánaszámolhatunk: a (70–74) alatt megadott kifejezések valóban kielégítik az (I–IV) egyenleteket.

c) *Keresztezett terek.* Jelentsék \mathfrak{E} és \mathfrak{H} a külső elektromos, ill. mágneses tér erősségét; ekkor a perturbációs energia időbeli középértékét mindkét tér jelenléte esetén

$$E_1 = \frac{3}{2} ea(\mathfrak{E}\mathfrak{A}) + \frac{e}{2m_0c} (\mathfrak{H}\mathfrak{B}) \quad (75)$$

adja meg, ahol a , mely az eddigi elméletben a Kepler-ellipszis nagytengelyét jelentette, most egyszerűen a $\frac{Ze^2}{2|E|}$ mennyiség rövid jelének tekintendő:

$$a = \frac{Ze^2}{2|E|}. \quad (76)$$

Ha bevezetjük az \mathfrak{E} -vel, ill. \mathfrak{H} -val párhuzamos \mathfrak{o}_F és \mathfrak{o}_H vektorokat, melyek abszolútértéke azon szekuláris frekvenciákkal egyezik meg, amelyeket a két külső homogén tér külön-külön hívna létre [vö. (9) és (10)]:

$$\mathfrak{o}_H = \frac{e\mathfrak{H}}{4\pi m_0 c}, \quad \mathfrak{o}_F = \frac{3}{4\pi} \sqrt{\frac{a}{Zm_0}} \mathfrak{E} = \frac{3}{4\pi} \frac{e\mathfrak{E}}{\sqrt{2m_0|E|}}, \quad (77)$$

úgy (75) az

$$E_1 = \sqrt{\frac{Z^2 Rh}{|E|}} (\mathfrak{A}\mathfrak{o}_F)h + 2\pi (\mathfrak{B}\mathfrak{o}_H) \quad (75a)$$

alakban is felírható.

Célszerű most már bevezetni¹⁶ a

$$\begin{aligned} 2\mathfrak{I}_1 &= \frac{2\pi}{h} \mathfrak{B} + \sqrt{\frac{Z^2 Rh}{|E|}} \mathfrak{A}, \\ 2\mathfrak{I}_2 &= \frac{2\pi}{h} \mathfrak{B} - \sqrt{\frac{Z^2 Rh}{|E|}} \mathfrak{A}, \end{aligned} \quad (78)$$

ill.

$$\frac{2\pi}{h} \mathfrak{B} = \mathfrak{I}_1 + \mathfrak{I}_2, \quad \sqrt{\frac{Z^2 Rh}{|E|}} \mathfrak{A} = \mathfrak{I}_1 - \mathfrak{I}_2 \quad (78a)$$

képletekkel definiált $\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2$ vektormátrixokat, valamint az

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_H + \mathbf{v}_F, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_H + \mathbf{v}_F$$

vektorokat, melyek abszolútértékét a 2. §-ban ω_1 -gyel, ill. ω_2 -vel jelöltük [vö. (18)]. A (75a) perturbációs energia akkor egyszerűen az

$$E_1 = (\mathfrak{J}_1 \mathbf{v}_1)h + (\mathfrak{J}_2 \mathbf{v}_2)h \quad (80)$$

alakba írható. Az (I—IV) egyenletekbe ugyancsak behelyettesítjük \mathfrak{A} -nak és \mathfrak{B} -nek az új $\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2$ vektormátrixokkal kifejezett (78a) alakját. Egyszerű számolással a következő összefüggéseket kapjuk:

$$\mathbf{I}_{1x} \mathbf{I}_{2x} = \mathbf{I}_{2x} \mathbf{I}_{1x}, \dots, \mathbf{I}_{1x} \mathbf{I}_{2y} = \mathbf{I}_{2y} \mathbf{I}_{1x}, \mathbf{I}_{2x} \mathbf{I}_{1y} = \mathbf{I}_{1y} \mathbf{I}_{2x}, \dots \quad (81)$$

$$[\mathfrak{J}_1 \mathfrak{J}_1] = i\mathfrak{J}_1, \quad [\mathfrak{J}_2 \mathfrak{J}_2] = i\mathfrak{J}_2, \quad (82)$$

$$\mathfrak{J}_1^2 = \mathfrak{J}_2^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{RhZ^2}{|E|} - 1 \right) = \frac{1}{4} (n^2 - 1) = \frac{n^*}{2} \left(\frac{n^*}{2} + 1 \right). \quad (83)$$

A (81) összefüggések azt fejezik ki, hogy \mathfrak{J}_1 bármely komponense felcserélhető \mathfrak{J}_2 bármely komponensével; a (82) összefüggések szerkezete teljesen analóg az (I) egyenletekével; (83) alatt az utolsó lépésben felhasználtuk a (68) sajátértékeket.

A (80) képlet szerint a keresztezett terek esetét az jellemzi, hogy $(\mathfrak{J}_1 \mathbf{v}_1)$ és $(\mathfrak{J}_2 \mathbf{v}_2)$, vagy ami ugyanaz, \mathfrak{J}_1 -nek és \mathfrak{J}_2 -nek \mathbf{v}_1 -gyel, ill. \mathbf{v}_2 -vel párhuzamos komponense, melyeket az $\mathfrak{J}_{1\parallel}$, ill. $\mathfrak{J}_{2\parallel}$ szimbólummal fogunk jelölni, átlós alakú. A (82) egyenletek megoldása ebben az esetben teljesen az (I) egyenletek \mathfrak{B}^2 és \mathbf{P}_z átlós alakját feltételezve elvégzett megoldásának mintájára történik. A k szám helyét $\frac{n^*}{2}$ foglalja el, m helyét pedig — a 2. §-ban (15) és (16) alatt használt jelöléseket alkalmazva — az $\frac{n^*}{2} - n_1$ és $\frac{n^*}{2} - n_2$ számok, melyek $-\frac{n^*}{2}$ -től $\frac{n^*}{2}$ -ig futnak. Kapjuk tehát:

$$(\mathfrak{J}_{1\parallel})_{n_1}^{n_1} = \frac{n^*}{2} - n_1, \quad (\mathfrak{J}_{2\parallel})_{n_2}^{n_2} = \frac{n^*}{2} - n_2, \quad 0 \leq n_1 \leq n^*, \quad 0 \leq n_2 \leq n^*,$$

$$E_1 = \left(\frac{n^*}{2} - n_1 \right) \omega_1 h + \left(\frac{n^*}{2} - n_2 \right) \omega_2 h \quad (84)$$

$$(\omega_1 = |\mathbf{v}_1|, \omega_2 = |\mathbf{v}_2|).$$

Az \mathbf{v}_1 , ill. \mathbf{v}_2 irányára merőleges síkra vetett $\mathfrak{J}_{1\perp}$, ill. $\mathfrak{J}_{2\perp}$ vetületek cirkuláris rezgéseket végeznek és így azokat az (56)-tal meghatározott \mathbf{P}_x és \mathbf{P}_y mátrixokkal analóg mátrixok állítják elő $\left(k-t \frac{n^*}{2} \right)$ -vel, m -et $\frac{n^*}{2} - n_1$ -gyel, ill. $\frac{n^*}{2} - n_2$ -vel kell helyettesítenünk: \mathfrak{J}_{\perp}^2 a $\mathbf{P}_x^2 + \mathbf{P}_y^2$ összegnek felel meg):

$$\begin{aligned} |\mathfrak{J}_{1\perp} \frac{n_1}{n_1+1}|^2 &= \frac{1}{2} (n_1 + 1) (n^* - n_1), \\ |\mathfrak{J}_{2\perp} \frac{n_2}{n_2+1}|^2 &= \frac{1}{2} (n_2 + 1) (n^* - n_2). \end{aligned} \quad (85)$$

A megadott kifejezések mellett a (81) és (82) egyenletek kielégülnek, és minthogy (57) analógiájára fennáll:

$$(\mathfrak{J}_1^2)_{n_1}^{n_1} = (\mathfrak{J}_2^2)_{n_2}^{n_2} = \frac{n^*}{2} \left(\frac{n^*}{2} + 1 \right)$$

(83) is teljesül az energia (68) értékei mellett.

Ezzel a 2. §-ban közölt valamennyi eredményt levezettük az új mechanikából.

6. § *A hidrogénszínkép és az alkáliszínképek viszonyának kérdéséről.* Már a 2. §-ban említés esett róla, hogy az új kvantummechanika alapján az anomális Zeeman-effektus értelmezéséhez még szükséges módosításai esetleg már az egyetlen elektronnal rendelkező atomok esetében megnyilatkoznak; speciálisan az az eredmény, amely szerint az ilyen atomok normálállapota nem-mágneses, bizonyára nem tekinthető még véglegesnek. Nemrég *Goudsmit* és *Uhlenbeck*¹⁷ állt elő egy speciális javaslattal abból a célból, hogy az anomális Zeeman-effektusról számot adjanak. Eszerint az elektron többé nem ponttöltésnek tekintendő, hanem egy kitüntetett tengelyt, impulzusmomentumot és (a normális érték kétszeresét kitevő anomális) mágnességet kell neki tulajdonítanunk. Azt, hogy ez a feltevés elégséges-e ahhoz, hogy az új kvantummechanikával összekapcsolva minden tapasztalati tényt megmagyarázzon, alkalmasint akkor lesz eldönthető, ha majd a relativisztikus finomszerkezet kiszámítása is megtörténik az új kvantummechanika alapján. Erre a tárgyalás jelenleg még nem terjedhetett ki, minthogy az $\frac{1}{r^2}$ időbeli középérték ehhez szükséges kiszámítását még nem sikerült elvégeznünk.

Mindazonáltal, a speciális modellszerű elképzelésektől függetlenül kézenfekvő megkérdezni, vajon a hidrogénszínkép (a finomszerkezetet és a külső terek befolyását is beleértve) felfogható-e mint az alkáli színképek, ill. röntgenszínképek határ-esete az atomtörzs által a világító elektronnal kifejtett centrális erő, ill. az árnyékolási számok eltűnő értéke mellett [úgyhogy az árnyékolási dublettet alkotó szintek egybeesnek].¹⁸ Ebben az esetben a Balmer-vonalak finomszerkezete az eddigi elméletből következő finomszerkezettől az energiaszintek helyzetében nem különbözne, eltérne azonban attól az intenzitások tekintetében, amennyiben a $\Delta k = \pm 1$ kiválasztási szabály helyét a $\Delta j = 0, \pm 1$ szabály foglalná el, mely megenged olyan komponenseket, amelyek az eddigi elmélet értelmében ki voltak zárva. *Goudsmit* és *Uhlenbeck*¹⁸ megmutatta, hogy a megfigyelések eredményei valószínűvé teszik: helytálló a kiválasztási szabályok ilyen megváltoztatása. Ugyanakkor azonban utalnak arra, hogy a hidrogénszínkép és az alkáliszínképek analógiájának keresztülvitele útjában ott áll a nehézség: az egyelektronos atomok színképének (a finomszerkezethez viszonyított) Zeeman-effektusa a rendelkezésre álló megfigyelések szerint egyáltalán nem látszik hasonlónak az alkáliszínképekéhez.

Noha így a kérdés, milyen mértékben vihető keresztül a szóban forgó összefüggés a hidrogénszínkép és az alkáliszínképek között, még nem tekinthető tisztázottnak, mégis jogos talán, ha legalábbis mindazokban az esetekben, amelyekben a relativisztikus (ill. a dublett-) finomszerkezettől el lehet tekinteni, ezen analógia útmutatását követjük. Így arra a feltevésre jutunk, hogy az olyan mágneses terekben, amelyben a Zeeman-felhasadás nagy a finomszerkezet komponenseinek távolságához képest, az egyelektronos atomok mágneses energiaszintjeinek száma és helyzete megegyezik az alkáliák Paschen—Back-termjeinek számával, ill. helyzetével. Ekkor

valamely külső erőterben a hidrogénatomhoz kétszer annyi állapotnak kell tartoznia, mint amennyi az előző §-ban az új kvantummechanika jelenlegi alapelvei alapján adódott (vagyis n^2 helyett $2n^2$ -nek). Valamely külső mágneses térben az m kvantumszám minden értékéhez (mely $-n^*$ és n^* közé esik) két mágneses energiaértéknek, $(m+1)o_Hh$ -nak és $(m-1)o_Hh$ -nak (o_H Larmor-frekvencia) kellene tartoznia, s éppúgy a keresztezett terekben minden, adott n^* , n_1 , n_2 kvantumszámokkal jellemzett állapotnak két állapotra kellene felhasadnia, melyek energiaértékei a (84) alatt megadott értéktől $\pm o_Hh$ -val különböznek. A korrespondencia-elv szerint ekkor itt csak olyan átmenetek lépnek fel, amelyekben a $\pm o_Hh$ járulékos tag előjele változatlan marad.

Döntésre a terméknek az előző §-ban levezetett rendszere, mely szerint a H atom normálállapota nem-mágneses, és az alkáliák Paschen—Back-termjeinek analógiájára itt szemügyre vett, a H atom normálállapotának mágneses térben a $\pm o_Hh$ energiaértéket tulajdonító termrendszer között a H atomsugarakkal inhomogén mágneses térben elvégzett Stern—Gerlach-féle eltérítési kísérletek nyújtanának lehetőséget.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

- [1] W. Heisenberg: ZS. f. Phys. **33**, 879, 1925; Magyar Fizikai Folyóirat **13**, 447, 1965.
 [2] ZS. f. Phys. **34**, 858, 1925; Magyar Fizikai Folyóirat **13**, 529, 1965.
 [3] Proc. Roy. Soc. **109**, 642, 1925; Magyar Fizikai Folyóirat **14**, 171, 1966.
 [4] ZS. f. Phys. **35**, 557, 1926; Magyar Fizikai Folyóirat **14**, 35, 1966. A következőkben erre a „Kvantummechanika II” megjelöléssel hivatkozunk.
 [5] H. A. Kramers: Physica **5**, 369, 1925.
 [6] Ez következik pl. s és n , valamint a ξ , η parabolikus koordinátáknak megfelelő n_z , n_η kvantumszámok között fennálló

$$n = n_z + n_\eta + |m|, \quad s = n_z - n_\eta$$

$$0 \leq n_z \leq n, \quad 0 \leq n_\eta \leq n$$

összefüggésekből.

- [7] O. Klein: ZS. f. Phys. **22**, 109, 1924.
 [8] W. Lenz: ZS. f. Phys. **24**, 197, 1924. Az ebben a munkában n_1 -gyel és n_2 -vel jelölt számok páratlan n -re nem egészek, hanem (amennyiben a periodikus rendszerekre vonatkozó kvantumszabályokhoz tartjuk magunkat) egységnyi lépésekben $-\frac{n}{2}$ -től $\frac{n}{2}$ -ig futnak, a határokat is beleértve.

- [9] ZS. f. Phys. 1. c.
 [10] Vegyük ehhez tekintetbe az $\mathbf{a}^2\mathbf{b} - \mathbf{b}\mathbf{a}^2 \equiv \mathbf{a}(\mathbf{a}\mathbf{b} - \mathbf{b}\mathbf{a}) + (\mathbf{a}\mathbf{b} - \mathbf{b}\mathbf{a})\mathbf{a}$ azonosságot.
 [11] Vö. „Kvantummechanika II”, 597. old. (3) egyenlet. Az ott \mathbf{M}_x -szel, \mathbf{M}_y -nal, \mathbf{M}_z -vel jelölt mennyiségek a negatív impulzusmomentum-komponenseknek felelnek meg.
 [12] Kvantummechanika II, 2. fej. 2. §
 [13] Uo. 2. fej. 2. § és 3. fej.
 [14] Uo. 2. fej. 2. § és 3. fej.
 [15] Uo. 4. fej. 1. § Vö. a 4. fej. 2. §-ban található fejtegetésekkel a Zeeman-effektusról.
 [16] A következőkkel kapcsolatban vö. Klein és Lenz ⁷, ill. ⁸ alatt idézett munkájával.
 [17] Naturwissensch. **13**, 953, 1925.
 [18] S. Goudsmit és G. E. Uhlenbeck: Physica **5**, 266, 1925. Hasonló megfontolásokat közölt velem korábban levélben A. Landé.

AZ AKADÉMIAI KIADÓ GONDOZÁSÁBAN
JELENT MEG

M. Zemplén Jolán

**A MAGYARORSZÁGI FIZIKA TÖRTÉNETE
1711-IG**

*317 oldal — 46 részben fakszimile ábra — 17×24 cm
Egészvásznon-kötésben 80,— Ft*

A forrásanyagok gazdag tárára épített munka első ízben ad teljes képet a magyarországi fizika korai történetéről. Fejtegetései kapcsán nyomon követhetjük, miként jutott a fizika tudománya mindig egy-egy gondolattal előbbre, hogyan tértek át az arisztotelészi és egyházi dogmákról lassan a kísérleteken alapuló mai fizikára.

**A MAGYARORSZÁGI FIZIKA TÖRTÉNETE
A XVIII. SZÁZADBAN**

*495 oldal — 124 nagyrészt fakszimile ábra — 17×24 cm
Egészvásznon-kötésben 100,— Ft*

M. Zemplén Jolán ebben a könyvében a fizika történetének azt a korszakát tárgyalja, amelyben az úgynevezett „klasszikus fizika” elterjed, s a fizika a természettudomány többi ágával együtt önálló, a filozófiától független szaktudománnyá válik.



AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST

40 000 CÍMSZÓ

FIZIKA—MATEMATIKA—CSILLAGÁSZAT
KÉMIA—BIOLÓGIA

TERMÉSZETTUDOMÁNYI LEXIKON

6 kötetben

Főszerkesztő ERDEY-GRÚZ TIBOR

Már most jegyeztesse elő a harmadik kötetet

Gy—K — kb. 900 oldal — 780 ábra — 4 színes képtábla
17×24 cm — Egészvásznon-kötésben kb. 150,—Ft

A tartalomból:

Gyógynövények — Hemoglobin — A Luna 9 felvételei a Hold
felszínéről — Hormonok — Hüllők — Idegrendszer — Integrál —
A kémia története — Klorofil — A kristályok fizikája és kémiája
— Kromoszóma — Kozmobiológia — Kozmogónia — Kőzetek

Az első két kötet még kapható

A—C — 816 oldal — 1290 ábra — 18 táblázat — 6 színes tábla
17×24 cm — Egészvásznon-kötésben 150,—Ft

D—G — 931 oldal — 797 ábra — 14 részben színes tábla
17×24 cm — Egészvásznon-kötésben 165,—Ft



AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1966. II. 13. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 9,8 (A/5) ív

66-6168 — Szegedi Nyomda

MAGYAR
AKADÉMIAI KIADÓ
KÖNYVTÁRA

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bitó János: Kisülések szondamérései I. Egyenáramú szondamérések</i>	185
<i>Hédervári Péter: A Föld belső szerkezetéről. III.</i>	223
<i>J. A. Szmorogyinszkij: Az elemi részek unitér szimmetriája</i>	233

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Pauli: A hidrogénszínképről az új kvantummechanika szempontjából</i>	271
----------------------------------------------------------------------------------	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIV. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 év terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Kúlereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KISÜLÉSEK SZONDAMÉRÉSEI II.

NEM STACIONER, VALAMINT KÜLSŐ MÁGNESES TÉRBE LEVŐ KISÜLÉSEK SZONDAMÉRÉSEI*

BITÓ JÁNOS

Híradástechnikai Ipari Kutató Intézet, Budapest

Összefoglalás

A szerző az előzőekben tárgyalt stacioner kisülések vizsgálatára alkalmazható szondamérési eljárásokból kiindulva rámutat a periódikus és nem-stacioner kisülések (plazmák) vizsgálatánál felmerülő nehézségekre, amelyek megszüntetik az alkalmazható szondamérési eljárások jellegét. Az Emeleus által javasolt váltakozó áramú, eloszlási függvény meghatározásából levezeti a Nölle által bevezetett egyenáramú szondamérési módszert, s utal annak nem-stacioner kisülések esetén való alkalmazhatóságára. Bemutatja a periódikus plazmák vizsgálatára alkalmas berendezést, a Ledrus-féle plazmográfot, röviden foglalkozik a *Fajt—Koncz*, *Waymouth*-valamint egy korábban általa már javasolt vizsgálati módszerrel. Vákolja a mikro-hullámú szondaméréseket, valamint a kisülések mágneses terének meghatározására szolgáló szondamérési eljárásokat.

1. Bevezetés

Ezen dolgozat első részében [1] azok a szondamérési módszerek kerültek bemutatásra, amelyek jól alkalmazhatók az egyenfeszültségű áramforrásról táplált kisülések diagnózisának megállapítása során. Ezek az egyenáramú szondamérési módszerek stacioner állapotban levő kisülések vizsgálatára alkalmasak.

Lényegileg mind a Langmuir-féle szondamérési elven alapulnak [2]. Alkalmazhatóságuk igen kiterjedt, használhatóságukat sok előnyös módszertani és apparatív szempont támasztja alá. Az egyenáramú szondamérések nemcsak a kisülés mikro-jellemzőinek megadására alkalmasak, hanem a töltéshordozók energiaeloszlási függvényének, diffúziós áramoknak, rekombinációs folyamatoknak, stb. jellemzésére is.

A most következő részben azok a szondamérési eljárások kerülnek tárgyalásra, amelyek nem stacioner kisülések, vagy külső mágneses térben levő kisülések esetén nyújtanak módot a kisülési jellemzők meghatározására.

A nem-stacioner kisülések vizsgálati módszerének kiválasztásánál alapvető szempontot képez, hogy a vizsgálandó jelenség milyen periodicitású; a szóban forgó folyamatok hogyan változnak az idővel. Az előzőekben ismertetett [1] két-szondás mérési módszer is alkalmazható, pl. nem túl gyorsan összeeső kisülések oszcillografikus vizsgálatánál. Azonban, ha a kisülési jellemzők időben gyorsan változnak, úgy a diszkusszió alapját nem képezheti a statikus feszültség-áram karakterisztika, hanem a dinamikus karakterisztikából kell kiindulni, amely a nem-stacioner folyamatokat is figyelembe veszi. Minden nem-stacioner kisüléshez egy karakterisztikus időt szokás megadni [3]. Ha e karakterisztikus idő, amely egy folyamat

* Érkezett 1964. július 5.



lejátszódására jellemző, sokkal nagyobb, mint pl. a szondakarakterisztika ionáram részének karakterisztikus ideje [3], úgy a diszkusszió során alapul lehet venni a sztatikus karakterisztikát. Ha a paraméterek meghatározása a szondakarakterisztika alsó, ionáram szakaszából történik, akkor az előbb említett szondamérésekre nézve karakterisztikus idő a

$$t_k \approx \frac{R}{\left(\frac{I_e}{m_i}\right)^{1/2}} \quad (1)$$

alakban adható meg [3], ahol

t_k az ionáram-szakasznál adódó karakterisztikus idő

T_e az elektronhőmérséklet

m_i az ionok tömege

R a szonda sugarával arányos tag, annak kb. 2–3-szorosa.

A dinamikus karakterisztika alapján való számolás igen nehézkes, s ugyanakkor sok pontatlanságot is rejt magában. Ezért olyan esetekben, amikor a vizsgált kisülési folyamat karakterisztikus ideje a szondamérésnél adódó karakterisztikus időnél kisebb, vagy azzal egyenlő, már nem alkalmazzák sem az egyszondás, sem pedig a többszondás mérési módszert; ez esetekben más eljáráshoz kell folyamodni.

Nem-stacioner kisülések vizsgálatánál lényegében arról van szó, hogy az egész szondakarakterisztikát — vagy legalább is a kiértékelendő karakterisztika szakaszt — olyan rövid idő alatt kell felvenni, ami alatt lényegesen nem változik még meg a vizsgált kisülési folyamat. Ez elvileg megoldható, s mint a továbbiakban ez kiderül, több ilyen mérési módszert is kidolgoztak már, azonban van egy gyakorlati időhatára az itt alkalmazható időfelbontásnak. Ezt a felbontási határt a szondakörüli tértöltési viszonyok és diffúziós viszonyok beállításához szükséges minimális idő szabja meg [4]. Könnyen belátható ugyanis, hogy ha a szonda feszültsége olyan gyorsan változik, hogy azt a szondaáram nem tudja egyensúlyi állapotokon át követni, úgy a nyert szondakarakterisztika alakja már nem lesz jellegzetes, az dinamikus jellegűvé válik, egyes szakaszai nem adnak reális felvilágosítást a kisülési tér pillanatnyi állapotáról. Szükséges tehát, hogy a szondakarakterisztika felvétele kvázistacionárius állapotokon át történjen. Minden szondafeszültségnél be kell állnia a szondakörüli egyensúlynak, s az ekkor adódó egyensúlyi szondaáramokat kell detektálni. Ezt a beállási időt az adott szondafeszültségekhez tartozó karakterisztikus idővel lehet jellemezni. Minimálisan ennyi időre van szükség a különböző pontokban a mérés elvégzéséhez. Ha a vizsgálandó kisülési folyamat lefutási ideje olyan kicsi, hogy nem teszi lehetővé a mérések során a kvázistacioner mérési feltételek teljesülését, úgy a szondamérés eredménye hamis lesz. Az egyes, későbbiekben ismertetésre kerülő mérési módszerek tárgyalásánál e kritérium teljesüléséről még szó lesz. Mindenesetre előljáróban annyit kell megemlíteni, hogy a szondamérések nem-stacioner kisülések vizsgálatánál való alkalmazása időkorláttal bír, amit a szondakörüli egyensúlyi állapotok beállási ideje határoz meg. Ennek sokkal kisebbnek kell lennie, mint a vizsgálandó kisülési folyamat karakterisztikus ideje.

E szempont szemelőtt tartása döntő annak megítélésénél, hogy a szóban forgó szondamérési módszer alkalmazható-e az adott nem-stacioner kisülés vizsgálatánál.

Ezen túlmenően a jelen dolgozat I. részében [1] felsorolt alapvető mérési feltételek teljesülése is általában szükséges majdnem minden mérési eljárásnál. Ha valamely mérési eljárásnál valamely kikötést el lehet hagyni, vagy valami engedményt lehet tenni, az a továbbiakban ezen eljárások tárgyalásánál külön említésre fog kerülni.

2. Az Emeleus-féle eloszlási analízis kiterjesztése

Az előzőekben [1] szó volt arról, hogy a töltéshordozók energiaeloszlása nem mindig felel meg a Maxwell—Boltzmann energiaeloszlásnak. Ennek megfelelően az egyenáramú kisüléseknél felvett szondakarakterisztika elektronáram felfutási szakasza nem mindig ad a féllogaritmikus koordináta-rendszerben történő ábrázolásnál egyenest. A különböző lehetséges energiaeloszlások vizsgálatára Emeleus adott meg egy váltakozó áramú eljárást [1, 5], amit Sloane és MacGregor, valamint Druyvesteyn alkalmazott és fejlesztett tovább [5], az egyenfeszültségű áramforrásról táplált kisülések vizsgálatához. E módszert felhasználva E. Nölle [6] kialakított egy olyan váltóáramú szondamérési módszert, amellyel gyors úton meg lehet adni a vizsgált kisülési tér potenciálját.

A módszer értelmében a szondára jutó V_s egyenfeszültségre Nölle egy

$$u = A \cdot \sin \omega t \quad (2)$$

alakú, igen kis amplitúdójú váltakozó feszültséget szuperponált az eredeti Emeleus-féle elképzelésnek megfelelően. Ekkor a szondán az

$$i_s = f(V_s + A \cdot \sin \omega t) \quad (3)$$

nagyságú szondaáram folyik, amely időben változik. Ezt az előzőek értelmében (1) Taylor-sorba fejte

$$i_s = f(V_s) + A \cdot \sin \omega t \cdot f'(V_s) + \frac{A^2 \sin^2 \omega t}{2!} f''(V_s) + \dots \quad (4)$$

adódik, ahonnan a

$$\sin^2 \omega t = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2\omega t \quad (5)$$

$$\sin^3 \omega t = \frac{3}{4} \sin \omega t - \frac{1}{4} \sin^3 \omega t \quad (6)$$

összefüggések alkalmazásával a (4) egyenlet áttekinthetőbb alakba írható, az egyenáramú és a váltóáramú komponensek szétválasztásával:

$$\begin{aligned} i_s = & \left\{ f(V_s) + \frac{A^2}{4} \cdot f''(V_s) + \frac{A^4}{64} f''''(V_s) + \dots \right\} + \\ & + \left\{ \left[A \cdot f'(V_s) + \frac{A^3}{8} f'''(V_s) + \dots \right] \sin \omega t \right\} + \\ & + \left\{ \left[\frac{A^2}{4} f''(V_s) + \frac{A^4}{84} f''''(V_s) + \dots \right] \cos 2\omega t \right\} - \\ & - \left\{ \left[\frac{A^3}{24} f'''(V_s) + \frac{A^5}{384} f'''''(V_s) + \dots \right] \sin 3\omega t \right\} + \dots \end{aligned} \quad (7)$$

A (7) sorfejtés első kapcsos zárójelében az egyenáramú komponens, a második kapcsos zárójelben a tiszta váltakozó áramú (ω körfrekvenciájú) komponens, a harmadik és negyedik kapcsos zárójelben pedig a felharmonikusokból adódó árami szerepel.

Ha az előzőek szerint a váltakozó áramú perturbáló feszültség amplitúdóját igen kicsire választjuk, annak magasabb hatványai az alacsonyabb hatványokhoz képest elhanyagolhatóak lesznek, s ennek megfelelően az egyenáramú komponensnél a szondaáram megváltozása a V_s szondapotenciálnál adódó szondaáramhoz képest:

$$\Delta i_s = \frac{A^2}{4} \cdot f''(V_s) \quad (8)$$

Ez volt kihasználva az előzőekben [1] az eloszlási függvény számításánál.

Ezek elemzésekor Nölle [6] rájött arra, hogy abban a szondaállapotban, amikor a szondapotenciál a környező kisülési tér potenciáljával egyezik, a szondakarakterisztikán fellépő könyök miatt az $f''(V_s) = 0$, s így a Δi_s is nullával lesz egyenlő. Ez egy további lehetőség a kisülési tér potenciáljának meghatározására [6]. Ez az eljárás azonban bizonyos fokig nehézkes, s így főleg csak kontroll méréseknél jön számításba.

A Nölle által javasolt másik módszer [6] azon a megfigyelésen alapul, hogy igen kis A perturbáló váltakozó áramú amplitúdó esetén a (7) egyenlet sorfejtésének váltakozó áramú komponensei a felharmonikusokkal együtt elhanyagolhatóak az első differenciálhányadosokhoz képest, s ekkor a szondán lefolyó váltakozó áramú komponens jó közelítéssel az

$$i_s \approx A \cdot f'(V_s) \sin \omega t \quad (9)$$

alakban adható meg. Mivel az $f'(V_s)$ függvénynek a V_g kisülési tér potenciálnál maximuma van, a (9) összefüggés értelmében a váltakozó áramú szondaáram-komponens is maximummal bír. Ennek tudatában [6] nem kell mást tenni a kisülési tér potenciáljának meghatározásához, mint a szondára kis amplitúdójú váltakozó áramú feszültségkomponenst adni, s a szondafeszültséget változtatni. Amelyik szondapotenciálnál a szondán lefolyó váltóáramú szondaáram-komponens maximumot ad, az felel meg a szondát körülvevő kisülési tér potenciáljának.

Nölle ellenőrizte a módszerét [6] oly módon, hogy egyenáramú kisüléseknél a szokásos úton felvette a szondakarakterisztikát, képezte az $f'(V_s)$ függvényt (grafikus úton), s azt ábrázolta, majd felvette váltóáramú szondaáram-komponens szonda-feszültségtől való függését. A maximumok jól egybeestek [6].

A mérésekhez 0,5 V körüli amplitúdójú váltófeszültséget alkalmazott, amelynek frekvenciája 1 kHz volt [6]. Végzett méréseket 100 kHz-es frekvencián is a zavaró rezgések kiküszöbölése végett. A módszer értelmében alkalmazott kapcsolat igen egyszerű, a váltóáramú szondaáram-komponens nagyságát mérőműszerrel detektálják, amit kapacitív kapcsolási elemmel védenek az egyenáramú szondaáram komponensről.

Azt találta [6], hogy a mérési mód jól alkalmazható a kisülési tér potenciáljának meghatározására, s az így nyert potenciálértékek függetlenek a szondák anyagától, méreteitől és bizonyos tartományban az alkalmazott perturbáló feszültségamplitúdó nagyságától. E függetlenséget kísérleti úton támasztotta alá [6].

Különösen előnyösen alkalmazható a módszer abban az esetben, ha a szonda felülete várhatóan elszennyeződik a mérés során, annak kilépési munkája megválto-

zik. Az itt adódó eredmények ugyanis sem a szonda felületétől, sem annak nagyságától, jellegétől nem függenek. A módszer további előnye, hogy abban az esetben is alkalmazható, amikor a kisülésben levő töltéshordozók energiaeloszlása nem felel meg a Maxwell—Boltzmann energiaeloszlásnak.

Az itt röviden vázolt módszert Nölle egyenfeszültségű áramforrásról táplált kisülések vizsgálatára alkalmazta. Ennek megfelelően e módszert a jelen dolgozat I. részében [1] lett volna célszerű megemlíteni, a többi egyenáramú szondamérési eljárással együtt. Az, hogy ez az eljárás mégis a nem-stacioner kisülések vizsgálati módszerei között kapott helyet, amiatt van, mert a szerző véleménye szerint e módszer bizonyos fokig átmenetet képez az egyenáramú szondamérési módszerek és az itt ismertetendő nem-stacioner kisülések esetében alkalmazható mérési módszerek között. Ugyanis lassan változó kisülési folyamatok vizsgálatára e módszer még alkalmas.

A szondára különböző nagyságú egyenfeszültséget adva, valamint a vizsgálni kívánt időpillanatban egy elég nagyfrekvenciájú (50—100 kHz) váltakozó áramkomponens, oszcilloszkóp segítségével ugyanezen a Nölle által felismert elven [6] gyorsan megkapható a kisülési tér potenciálja a vizsgált helyen. A nem-stacioner esetben végzendő mérésnél az egyenáramú szondapotenciál kikeresése és azt megfelelően a perturbáló váltófeszültség megfelelő frekvenciájának kiválasztása képvisel fontos szempontot. Ezen váltóáramú, periodikus kisülések esetében alkalmazható mérési módszer is ugyanazokkal az előnyökkel rendelkezik, mint a Nölle által leírt [6] egyenáramú kisüléseknél alkalmazható szondamérési módszer.

A váltófeszültség frekvenciáját és annak alkalmazási időintervallumát a kívánt időfelbontás és a mérés pontossága szabja meg. E mérés főleg olyan esetekben jöhet számításba, amikor a nem-stacioner kisülés vizsgálatánál fix fázisvonatkoztatási rendszer áll rendelkezésre, vagy legalább is egy kitüntetett időpillanat, amelyhez képest a mérési pontokat jól reprodukálható módon lehet megválasztani.

3. A *Ledrus-féle plazmográf*

A jelenleg rendelkezésre álló irodalmi adatok szerint a legelső, periodikus kisülési folyamatok vizsgálatára alkalmas szondamérési eljárás *R. A. Ledrus* nevéhez fűződik [7]. 1938-ban publikálta [7] a „plazmográfnek” nevezett mérési berendezés elvét és főbb jellemzőit. Ezt azóta modern elektronikával kiegészítve igen jól fel tudják használni, többek között a higanygőzös egyenirányítók és a váltakozó áramról táplált fénycsővek tulajdonságainak vizsgálatánál az ACEC Nucleonic Laboratories-ben.

Ledrus a plazmográf elvének megalkotásánál alkalmazott gondolatmenetet a későbbiekben részleteiben is alátámasztotta kísérleti úton [7].

Ha adva van egy meghatározott periódussal változó plazma, vagy kisülési tér, úgy annak egy adott ponton vett potenciálja is periodikusan változik a meghatározott frekvenciával. Ha a kisülési térbe benyúló szondára egy adott referencia-ponthoz képest valamilyen egyenfeszültség kerül, akkor a szondán lefolyó áram is periodikusan változó lesz, minden egyes kisülési időponthoz egy jól meghatározott periodikusan ismétlődő áramérték fog adódni. Ez az áramérték az adott időpillanathoz tartozó szondakarakterisztika egy pontjának felel meg, de hogy melyiknek, azt nem lehet tudni. A szondaáram tehát a különböző időpillanatokhoz tartozó

szondakarakterisztikák egy-egy jellemző pontjából tevődik össze, mivel ezek nem összetartozó értékek, az így adódó görbe nem kiértékelhető, a kisülés jellemzőire nézve nem ad felvilágosítást. Az így adódó szondafeszültség-szondaáram görbe tehát nem a vizsgálni kívánt szondakarakterisztika.

Belátható, hogy a periodikus kisülés frekvenciájával azonos frekvenciájú és jellegű szondafeszültség alkalmazásakor is az előzőekhez hasonló eset áll elő. A szondán lefolyó ugyancsak periodikus szondaáram a különböző időpillanatokhoz tartozó szondakarakterisztikák egy-egy jól meghatározott pontjából tevődik össze. E karakterisztikapontok helyzete (a szondaáram nagysága) a kisülési térhez képest vett pillanatnyi szondapotenciál értéktől függ, ami ez esetben minden periódusra ugyanúgy ismétlődő, fix lefutású értékekből áll.

Ahhoz, hogy a vizsgált periodikus kisülés egy adott időpillanatában a kisülési jellemzők megadhatók legyenek, fel kell venni ezen időpillanatban a teljes szondakarakterisztikát. Itt ismét utalni kell arra, hogy e mérés elvégezhetőségének gyakorlatilag az a kritériuma, hogy az egyes szondapotenciáloknál pillanatnyi egyensúlyi helyzet álljon elő, s az így fellépő, jó közelítéssel stationernek vehető szondaáramokat lehessen regisztrálni.

Ehhez Ledrus olyan frekvenciájú szondafeszültséget választott ki, amelynek frekvenciája a vizsgálandó kisülési folyamat frekvenciájával azonos volt, azonban a szondafeszültség lefutásának időtartama a vizsgált kisülési jel periódusához képest igen kicsiny volt. Az észlelést oszcilloszkopikus úton végezte. Az oszcilloszkóp rácsára adott negatív feszültséggel azt egy egész periódusra lezárta, eltekintve egy kiválasztott időpillanattól [7]. Ezen időpillanat időtartamát a vizsgált kisülési folyamat és a szondakörüli jelenségekre jellemző karakterisztikus időhöz kellett viszonyítani. A kiválasztott időpillanatban egy elég nagy pozitív impulzussal nyitotta az oszcilloszkóprácsát, s ugyanezt az impulzust ráadta a szondára, s az impulzus feszültségének megfelelő beállításával, időtartamának alkalmas megválasztásával a szondakarakterisztika felvehető volt. A szondaáramot egy szondakörben elhelyezett ellenállás két végéről a mérés időtartamával szinkron nyitott katódsugárcső vertikális bemenetére vitte. A horizontális bemenetre a szondafeszültségként használt mérőfeszültség került, s ez adta az eltérítést. A mérőfeszültség lecsengésével az erre szinkronizált oszcilloszkóp ismét lezár, s a periódus további részében zárva is marad. Az oszcilloszkóp ernyőjén azonban annak utánvilágítása miatt a vizsgálni kívánt szondakarakterisztika egy bizonyos ideig fennmarad. A következő periódusban a kisülésnek ugyanezen időpillanatában az itt leírt folyamat ismétlődik, s megint megjelenik ugyanez a szondakarakterisztika. Ha az oszcilloszkóp ernyőjének utánvilágítási ideje nagyobb, mint a vizsgált kisülési folyamat periódusideje, úgy állandó kép jelenik meg az ernyőn, amely így könnyen lefényképezhető, diszkutálható.

Ezzel egy adott időintervallumra megadható a szondakarakterisztika. Ha az oszcilloszkóp lezárását alkalmasan változtatjuk, pl. a mérő feszültségimpulzus időbeli eltolásával, egy egész félperiódusra nézve megadható a kisülési tér potenciáljának vizsgált helyen felvett értéke, valamint az ebből számítható kisülési jellemzők időfüggése is.

A Ledrus által alkalmazott első mérési módszernél a szondára jutó impulzus időtartama $20\ \mu\text{sec}$ volt [7], ma már esetenként $2\ \mu\text{sec}$ -os feszültségimpulzusokkal is dolgoznak, ami igen nagy időfelbontást tesz lehetővé. Ledrus az általa ismertetett módszert elég bonyolult elektronikus berendezéssel látta el [7], s több-oszcilloszkópos

észlelési módszert vezetett be. Az általa kialakított mérési elrendezés volt lényegében tehát az első, amely lehetővé tette a nem-stacioner kisülési folyamatok (plazmák) részletes vizsgálatát.

4. A Fajt—Koncz módszer

A Fajt—Koncz módszer [8] szerinti szondamérés viszonylag hosszadalmasabb, mint az előbb ismertetett Ledrus-féle módszer, de apparatíve annál sokkal kisebb felkészültséget igényel.

A szondára valamelyik kiválasztott elektródhoz képest különböző nagyságú egyenfeszültséget adnak [8], Egy adott egyenfeszültség esetén a szondán lefolyó áram periodikus lesz, a vizsgált kisülési tér periódusának megfelelő frekvenciával fog változni.

Az előzőekben utaltak szerint az így adódó szondaáram az egyes különböző időpontokhoz tartozó szondaáramokból tevődik össze. Az így nyert görbe minden pontjának egy közös jellemzője van: az adott szondafeszültség, amely ez esetben valamely elektródhoz viszonyított egyenfeszültség, s ennek értéke előre beállított, de tetszés szerint változtatható. Ezt a feszültségértéket célszerű a kisülés pillanatnyi anódjához képest mérni, s ehhez képest negatív potenciálra helyezni a szondát. Az ezt követő félperiódusban ugyanis a szonda a katódhoz képest lesz negatívabb potenciálón, s ekkor elhanyagolhatóan kis ionáram fog csak folyni. Abban az esetben viszont, ha a szondát a szondakarakterisztika felvétele érdekében a pillanatnyi katódhoz képest magasabb potenciálra helyezzük, a soronkövetkező félperiódusban a szonda még az előzőekben katódi szerepet betöltő, de jelenleg már anódi periódusban levő elektród potenciáljánál is magasabb potenciálra kerül, ami katasztrófálisan nagy szondaáramokat tesz lehetővé. Ez mindenképp kerülendő, mert ekkor nemcsak a mérendő viszonyok változnak meg, hanem maga a szonda, sőt a kisülési cső is tönkremehet. Ennek megfelelően a méréseknél valamelyik elektródhoz képest alacsonyabb potenciálra kerül a szonda, s így mérés csak abban a félperiódusban történik, amikor a kiválasztott elektród pillanatnyilag anódi szerepet tölt be.

Az ekkor adódó szondaáram az alkalmazott szondafeszültségre jellemző. Ez oszcilloszkopikus úton vizsgálható, felvive egy szondaköri ellenállás két végéről az azon fellépő feszültségesést egy oszcilloszkóp vertikális bemenetére.

Különböző szondafeszültségek (kiválasztott elektródhoz képest alkalmazott egyenfeszültségek) alkalmazásával egész sereg szondaáram görbe alakul ki, amely fényképezhető, vagy lerajzolható az oszcilloszkóp ernyőjén. A fázisviszonyok könnyebb azonosítása végett célszerű kétsugaras oszcilloszkópot alkalmazni, s a másik vertikális bemenetre a kisülési áram időbeli lefutását felvinni.

A várhatóan számításbajövő szondafeszültségeknél lefényképezve az adódó szondaáram időbeli lefutását, egy-egy tetszőleges időpillanatban a felvett szondaáramokból grafikus úton megadható a teljes szondakarakterisztika. A szondakarakterisztika kielégítő pontosságú felvételéhez célszerű sok szondafeszültség mellett felvenni az adódó szondaáram görbéket, azaz elég nagyszámú szondakarakterisztika pontot megszerkeszteni.

Elég nagy ernyőjű oszcilloszkóp esetén, megfelelő nagyítást alkalmazva a fényképfelvételek elkészítésével elég nagyszámú mérési pontban megadható a szondakarakterisztika, amelyből az ismert módon számolhatók a kisülési paraméterek

egyes időpillanatokban felvett értéke, majd pedig ezek ismeretében megadható e kisülési paraméterek időfüggése is.

E váltakozó áramú szondamérési módszer hátránya, hogy pontossága igen korlátozott, a fázisszögek azonosítása, a szondaáramok meghatározása, valamint grafikus úton elvégzett értékelések miatt, s főleg az utóbbi grafikus értékelések következtében sok hibalehetőséggel kell számolni. Az így elérhető időfelbontást főleg az oszcilloszkóp ernyőmérete korlátozza, valamint az oszcilloszkóp rajzolási élessége. Ez az eljárás a szerzők szerint [8] sem alkalmazható gyors lefutású kisülési folyamatok, vagy lecsengési jelenségek, kommutációs áramszakaszok vizsgálatánál. A jelen dolgozat szerzője részt vett olyan vizsgálatokban [9], amelyek során e módszer került alkalmazásra, azonban az eljárás hosszadalmasnak bizonyult, a nyert oszcilloszkopikus felvételek kiértékelése viszonylag körülményesen volt csak lehetséges. Mindemellett a *Fajt—Koncz* eljárással nyert eredmények jól reprodukálhatóak voltak, amennyiben a kiértékelések elvégzése kellő gonddal történt meg [9].

5. A Waymouth-féle impulzus módszer

Az előzőekben ismertetett váltakozó áramú kisülések vizsgálatánál alkalmazható mérési módszerekhez képest komoly haladást jelentett a *Waymouth* által kidolgozott impulzusteknikán alapuló szondamérési módszer [10] megjelenése.

Waymouth egy impulzus módszeren alapuló szondamérési eljárást alakított ki [10], amely szintén a *Langmuir* által felismert szondamérési elven [2] alapul. Lényegileg a *Waymouth*-féle eljárás sok vonatkozásban hasonlít a *Ledrus*-féle eljáráshoz [7].

A *Waymouth*-féle módszernél [10] a mérésnél a vizsgálni kívánt kisülési térhez képest a szondára mintegy 40–50 V-al alacsonyabb potenciál kerül. A vizsgált kisülés minden periódusában egy feszültségimpulzust ad a szondára, s ennek amplitúdóját úgy választja meg, hogy az impulzus felfutásának megfelelően a szonda egy kis időre a kisülési térhez képest még magasabb potenciált is felvegyen. Így biztosítja azt, hogy az impulzus felfutásával változó szondafeszültség még a kisülési tér potenciáljánál is magasabb legyen, azaz ennek megfelelően az elektron telítési áramszakasznak egy része is vizsgálható legyen. Ez főleg a vizsgált kisülési tér potenciáljának meghatározásához fontos. Az impulzus felfutásának és pillanatnyi amplitúdójának megfelelően változik a szondán lefolyó áram is. Ilyen módon az impulzus feszültségének alkalmas megválasztásával oszcilloszkóp segítségével felvehető a vizsgált kisülési szakaszra jellemző *Langmuir*-féle szondakarakterisztika, s innen a szokásos eljárás alkalmazásával [1] az adott időpillanatban megadhatók a főbb kisülési jellemzők. Az impulzus bármely kisülési időpillanatban ráadható a szondára, s annak fázisváltoztatásával le lehet tapogatni a periodikus, vagy általános esetben nem-stacioner kisülési folyamat vizsgálni kívánt pontjait.

Waymouth a méréseit 60 Hz-ről táplált periodikus kisüléseknél végezte [10]. A mérések előtt a szondafelületet erős ionbombázással és esetenként nagyfrekvenciás erőter alkalmazásával tisztította meg a felületre lerakódó szennyezésektől [10]. Az eljárást a katódkörüli kisülési tér vizsgálatára használta fel, kimutatva a negatív glimmfényben jelen levő nagyenergiájú primer elektronokat, valamint a szekunder elektronok jelenlétét. E vizsgálati módszert alkalmazva felvette [10] a töltéshordozók e szakaszbeli energiaeloszlását és a primer elektronok relatív koncentrációjának függését a katódtól mért különböző távolságokban.

A módszer ismertetésénél leírja [10], hogy az általa bevezetett eljárás alkalmas egyenfeszültségről táplált kisülések vizsgálatára is, de magát az eljárást *Waymouth* csak a katód közelében végbemenő, elektronokkal kapcsolatos energetikai vizsgálatoknál alkalmazza. A módszer segítségével semmiféle időfüggést nem mutat ki.

Utal [10] a szondamérések helyes megválasztására, valamint a szennyezések (főleg oxidkátódos kisülések esetén) megfelelő eltávolításának fontosságára.

Az általa alkalmazott mérőimpulzus időtartama $1\ \mu\text{sec}$ körül volt [10].

6. Egy további vizsgálati módszer

E módszer lényegében a Fajt—Koncz-féle eljárás és a *Waymouth*-féle szondamérési mód továbbfejlesztése. A legtöbb nem-stacioner kisülések esetén alkalmazható szondamérési módszer közös jellemzője az, hogy ezeknél a kívánt időfelbontást rövid időtartamú impulzusokkal biztosítják. Ez esetben is a szondakarakterisztika felvétele ilyen mérőimpulzus alkalmazásával történik, azonban e módszer előnye, hogy egyesíti a *Fajt—Koncz* és a *Waymouth* által vázolt szondamérési módszer előnyös tulajdonságait.

A mérések reális eredményeinek biztosítására itt is figyelembe kell venni bizonyos kikötéseket, s amennyiben ezek valamelyike nem áll fenn, úgy a nyert eredmények hamisak lesznek. Ezzel egyidőben gyakran a felvett szondakarakterisztika is eltorzul, erősen eltér az ideális szondakarakterisztika alakjától [1]. Ez mindenestre igen jó figyelmeztetés a mérési feltételek hiányos teljesülésére vonatkozóan.

A fontosabb kikötések a következők:

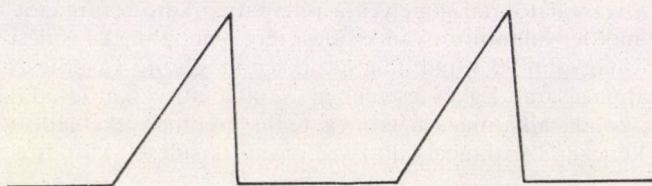
a) A szonda felülete a töltéshordozók közepes szabad úthosszához képest kicsi legyen, hogy minél kevésbé zavarja a vizsgálandó kisülési folyamatokat.

b) A töltéshordozók energiaeloszlása feleljen meg a Maxwell—Boltzmann eloszlásnak.

c) A negatív töltéshordozók is és a pozitív töltéshordozók is egyneműek legyenek (egyszeres ionizáltság, azonos töltés, tömeg).

d) A mérés folyamán a szondafelület kilépési munkája ne változzék meg.

Ezt az eljárást [11] az eddigiek során az 50 Hz-es frekvenciájú váltakozó áramú kisülések vizsgálatára alkalmazták [12, 13]. A *Waymouth* által bevezetett módszernek megfelelően [10] a szondára itt is feszültségimpulzus jut. Ezen mérőimpulzus alakja torzított ék-alak; a lefutási ág sokkal meredekebb, mint az impulzus felfutási szakasza. Az impulzus alakja az 1. ábrán látható. Az impulzus nagysága a 0—90 V feszültségtartományban folyamatosan változtatható, az alkalmazott elektronikus berendezés segítségével.



1. ábra. Az impulzusmódszeren alapuló szondaméréseknél alkalmazott impulzus alakja

Az impulzus időtartamának megválasztásánál az előzőek értelmében két szempontot kell figyelembe venni és mérlegelni. Miután nem-stacioner kisülési folyamat vizsgálatáról van szó, a vizsgálatokat a nagyobb időfelbontás és pontosság érdekében igen rövid, kis ideig tartó impulzusokkal célszerű végezni, különösen olyan esetekben, amikor a vizsgálatok tárgyát a gyors lefutású, tranziens szakaszok (pl. a kezdeti ionizációs felépülési szakasz, a deionizációs szakasz, kommutációs szakasz) képezik.

Másrészt ugyanakkor figyelembe kell venni azt is, hogy az impulzus felfutási szakaszának ideje alatt kell megtörténnie a teljes szondakarakterisztika felvételének. Amennyiben ez nem kvázistacionárius helyzeteken át történik, a nyert eredmények nem reálisak. A Langevin-egyenletből kiindulva megadható a szondát körülvevő tértöltési réteg egyensúlyi helyzetének beállításához szükséges idő. Ez ugyanakkor kísérleti úton is ellenőrizhető, a mérőimpulzus időtartamának változtatásával. Az impulzus időtartamát folyamatosan csökkentve egy jól meghatározott időtartamnál a szondakarakterisztikán torzulások kezdenek mutatkozni, amelyek az impulzus időtartamának további csökkentésével csak erősödnek.

A számítások és a kísérleti adatok alapján a $0,1\text{--}0,5\text{ }\mu\text{sec}$ közötti időtartamú impulzusokkal történő mérés adta a legjobban kiértékelhető karakterisztikákat, kielégítő pontosságú időfelbontás mellett.

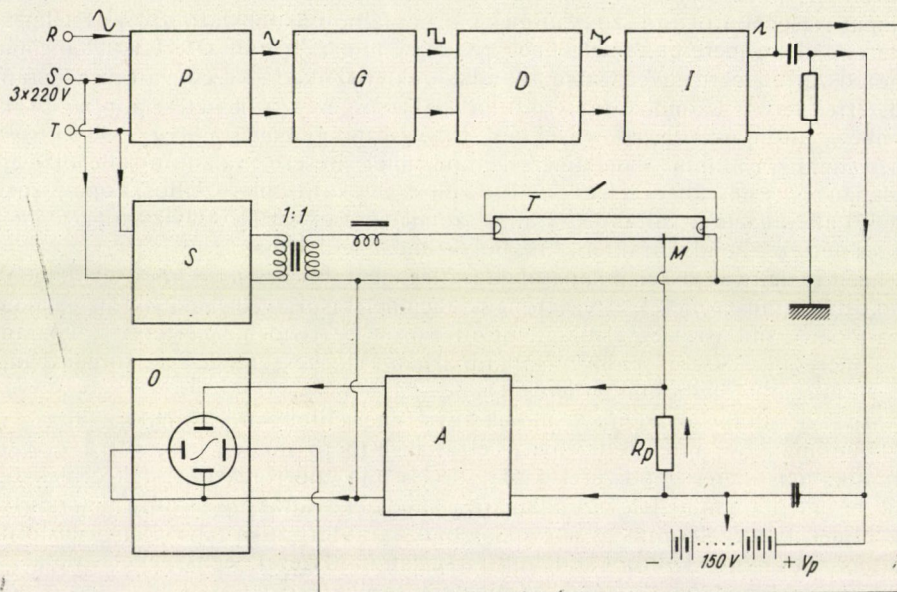
A szondafelületek megtisztítása ez esetben is, mint Waymouth-nál [10] komoly gondot okozott. A három kínálkozó lehetőséget — az elektronsugaras, ionsugaras és nagyfrekvenciás erőterrel történő felületmegtisztítás — összevetve, a legkielégítőbb eredményt az elektronsugaras felületmegtisztítás adta, míg a leggyorsabb a nagyfrekvenciás erőterben való tisztítási eljárás volt. Ez utóbbinak egyetlen hátránya, hogy bizonyos fókig megemeli a szonda és környezetének hőmérsékletét, s ezáltal pillanatnyi eltolódásokat hozhat a gázhőmérsékletben. Ennek hatása azonban a méréseknél nem volt kimutatható, ezért ezen nagyfrekvenciás módszer alkalmazása bizonyult a legcélravezetőbbnek.

E szondamérési módszer segítségével — a Waymouth-féle módszerrel [10] szemben — nemcsak a katód körüli terek vizsgálata lehetséges, hanem az egész kisülési tér megfigyelése is. Ez olyan módon biztosítható, hogy a szondára, a Fajt—Koncz módszernél követett metódusnak megfelelően egy egyenfeszültség is kerül, amelynek referenciapontját valamelyik elektród képezi. Az ott részletezett okoknál fogva célszerűbb a kiválasztott elektródhoz képest alacsonyabb potenciálra helyezni a szondát, s a szondára így a pillanatnyi anódhoz képest negatívabb egyenfeszültséget adni. Ekkor a kisülés anódi félperiódusa és a kisülési tér anódi része, valamint pozitív oszlopának anód felé eső szakasza a $0\text{--}90\text{ V}$ között változtatható amplitúdójú mérőimpulzusokkal letapogatható, valamint a kisülési tér potenciálja a megfelelően megválasztott szonda egyenfeszültség segítségével meghatározható.

Azoknál a vizsgálatoknál, amelyek a pillanatnyi katódi funkciót végző elektród közelében folynak le, valamint olyan kisülési terekben, ahol a kisülési tér potenciálja várhatóan nem nagyobb 90 V -nál, nincs szükség kiegészítő egyenfeszültségű szonda-feszültség alkalmazására. Egyes esetekben a pillanatnyi katódnál kevéssel pozitívabbra emelt szonda alkalmazása is még reális eredményeket adott. Ilyen módon fel lehetett térképezni az átlagos váltakozó áramú kisülések katódtól anódig terjedő tereit.

A vizsgálati módszer blokkdiagrammját a 2. ábra mutatja be. Az S stabilizátorról működtetett váltakozó feszültségű áramforrásról táplált T kisülésses cső M mérő-

szondájára a vizsgálni kívánt, P fázistoló által meghatározható időpontban az I impulzusgenerátorból egy ismert nagyságú és az előzőekben ismertetett alakú impulzus jut. Az M -szonda a V_p szondapotenciál beállítására szolgáló egyenfeszültség révén különböző alappotenciálokra állítható be, a vizsgálat helyének és céljának megfelelően.



2. ábra. Az újonnan kialakított szondamérési módszer blokkdiagramja

Az I impulzusgenerátorba a jel a G négyszöggenerátorból a D differenciáló egységen át jut. Ha a mérőimpulzus megemeli az M szonda pillanatnyi feszültségét, úgy ennek megfelelően az R_p szondaköri ellenálláson átfolyó áram az A differenciaerősítőn felerősítve az O oszcilloszkóp vertikális bemenetére jut, míg a horizontális szinkronizáló eltérítést az alkalmazott impulzus bevezetésével lehet biztosítani.

Így az impulzus időtartama alatt felvehető a kisülés egy meghatározott, de tetszőlegesen változtatható időpillanatában a vizsgált kisülési helyen a Langmuir-féle szondakarakterisztika.

A módszer az eddigiekben csak periodikus kisülések vizsgálatánál került alkalmazásra [11–13], s itt az alkalmazott impulzus frekvenciája a kisülés frekvenciájával megegyezett. A 2. ábrán látható P fázistolóval a kisülés tetszőleges időpillanatában fel lehet venni a szondakarakteristikát azáltal, hogy a mérőimpulzus fázisát tetszőlegesen be lehet állítani.

Abban a félperiódusban, amikor a szondára nem jut impulzus, állandó feszültség van, ami az azzal összekötött elektród, ill. az esetlegesen valamely elektródhoz képest alkalmazott V_p szondafeszültség révén egyértelműen meg van határozva. Ezalatt mérés nem történik.

Az adott fázisszögnél megjelenő karakterisztika (pl. 50 Hz-es kisüléseknél másodpercenként ötvenszer jelenik meg a szondakarakterisztika) megfelelő nagyságú oszcilloszkóp-ernyő alkalmazásával jól kiértékelhető, vagy fényképezhető.

Ez a szondamérési módszer jól alkalmazható egyenfeszültségű áramforrásról táplált kisülések szondakarakterisztikájának felvételénél is. Itt a mérőimpulzus időtartamát célszerű nagyra választani, miután nem periodikus, stacioner kisülési folyamat vizsgálatáról van szó, s itt esik az időfelbontásból származó követelmény. Történtek olyan mérések, amelyeknél összehasonlításra került az eredeti Langmuir-féle módszerrel mért egyenáramú szondakarakterisztika, és ezen váltakozó áramú módszerrel felvett szondakarakterisztika alakja és ezek jellegzetes pontjai. A két különböző úton nyert eredmények jól megegyeztek egymással. Ez egy lehetőség ezen váltakozó áramú szondamérési mód hitelesítésére, valamint ellenőrzésére. Általában egyenfeszültséggel és váltófeszültséggel kalibrált oszcilloszkópot szokás [11–13] alkalmazni a váltakozó áramú szondamérésekhez, így a vizsgált tér potenciálja a felvett szondakarakteristikából azonnal leolvasható.

Ezen itt leírt módszer pillanatnyilag a legfejlettebb vizsgálati módszer, amely a váltakozó áramú kisülések és egyéb nem-stacioner kisülési folyamatok vizsgálatánál szóba jöhet. E módszer egyesíti az előbb felsorolt és röviden ismertetett váltóáramú szondamérési módszerek előnyeit, alkalmazható az egész kisülési tartományban, s ugyanakkor jó időfelbontás érhető el vele.

Mivel a váltakozó áramú kisülések egyre kiterjedtebben kerülnek alkalmazásra mind tudományos, mind pedig ipari célzattal, érthető módon megnőtt a vizsgálatokra alkalmas mérési módszerek kialakítására irányuló törekvés. Legkézenfekvőbb a jól bevált Langmuir-féle szondamérési módszer váltakozó áramú kiterjesztése volt. Ennél az időfelbontás és a gyors szondakarakterisztika felvételének biztosításával ma már az itt vázolt jól kialakult vizsgálati módszerek segítségével a váltakozó áramú, vagy periodikus kisülések paraméterei meghatározhatók. Lényegileg minden itt ismertetett módszer közös alapvonással rendelkezik, csak az alkalmazhatósági terület, apparatív igény, mérési gyorsaság, egyszerűség terén vannak némi eltérések.

Az irodalomban találhatók már eredmények [7–13], amelyeket ezen váltakozó áramú szondamérési módszerek alkalmazásával nyertek. Ismereteseek a Ledrus-féle módszer [7] alkalmazásával higanygőz egyenirányítók esetén adódó mérési eredmények, a Fajt–Koncz-módszer [8] alkalmazásával nyert katód-, anódási görbék, elektronhőmérséklet, elektronkoncentráció, rekombináció stb. időfüggésére felvett összefüggések [9], a Weymouth-féle mérések [10] katódoldali energiaeloszlási eredményei, valamint a saját módszerünk segítségével a periodikus kisülések katód-esésének, potenciálgradiensének idő és nyomásfüggésére, valamint segédelektrodáktól való függésére vonatkozó eredmények [11–12]. E váltakozó áramú periodikus kisülések vizsgálatánál alkalmazható szondamérési módszerek révén még további alapvetően fontos felvilágosítások nyerhetők a kisülési alapfolyamatokra nézve.

7. Szondamérések külső mágneses térben

Ha a kisülés külső mágneses térben áll fenn, várhatóan megváltoznak a benne végbemenő alapfolyamatok. Főleg az elektronok mozgását befolyásolja a mágneses tér jelenléte [14–15]. Ennek megfelelően külső mágneses tér esetén elvégzett szondamérések karakterisztikái megváltoznak még akkor is, ha a kisülési tér paraméterei

(elektron-, ionkoncentráció, elektron-, ionhőmérséklet, kisülési tér potenciálja) lényegesen nem változnak meg.

Kérdés, milyen befolyással bír a mágneses tér a szondakarakterisztikára, s e befolyást lehet-e jellemezni, vagy ellensúlyozni. E kérdés nemcsak önmagában érdekes fizikai probléma, hanem komoly műszaki háttere is van, olyan esetekben ugyanis, amikor a kisülési áram egy bizonyos kritikus értéknél nagyobb, számolni kell a kisülés saját mágneses terével, amelynek jelenléte módosítja a szondamérések eredményeit.

További kérdés, hogy a külső mágneses tér jelenléte miatt adódik-e lehetőség további eddig nem meghatározható kisüléssel jellemzők, vagy összefüggések megadására.

A vonatkozó irodalom [14–19] alapján azt lehet mondani, hogy a mágneses tér (külső vagy belső, saját) jelenléte eltorzítja a szondakarakterisztikát, különösen annak elektronáram szakaszát befolyásolja a mágneses térnek az elektronok mozgására kifejtett erős hatásán keresztül. Mindenesetre e befolyás függ a mágneses tér jellegétől, irányától és nagyságától. A mágneses tér szondakarakterisztikára kifejtett hatását az eddigiek alapján nem lehet korrigálni, vagy kompenzálni, sajnos a mágneses tér jelenléte nem is teszi lehetővé semmi újabb kisülési paraméter, vagy összefüggés meghatározását [11–12].

A mágneses tér iránya várhatóan befolyásolja a szondaáramot, hiszen a töltött részek másképp mozognak mágneses térre merőlegesen, mint azzal párhuzamosan. Emiatt a mágneses tér jelenlétében az eddig alkalmazott elektromos szondamérési módszer már nem alkalmazható változatlan formában.

Kimutatható [16], hogy ha a szonda méretei úgy vannak megválasztva, hogy azok kisebbek legyenek a ciklotron sugárnál, a mágneses tér hatása elhanyagolható. Gyakorlatilag ez az elektronokra nézve igen kicsiny ciklotron-sugarak miatt azt jelenti, hogy a szondamérés csak az ionáram szakasz és az ionáram telítési szakasz felvételére korlátozódhat. Az ionok ciklotron-sugarához képest általában mindig kisebbre meg lehet választani a szondaméreteket. Ezért szokás az előzőekben [1] ismertetett ionáramszakaszból történő szondamérési eljárást használni külső mágneses tér jelenlétében.

A mágneses tér megváltoztatja a szondára jutó töltéshordozó áram nagyságát. A H nagyságú, szonda tengelyével párhuzamos mágneses tér esetében a szondára jutó áram az

$$I_p = 2\pi \cdot R_0 \cdot n \cdot e \cdot l \int_{u_1}^{u_2} U du \int_{v_1}^{v_2} f(U, V) dv \quad (10)$$

összefüggésből kiindulva adható meg, ahol

- I_p a szondaáram,
- R_0 az a sugár, amelyen belül a szondakörüli mágneses tér hat. R_0 nagyobb, mint a Langmuir-féle tértöltési tartomány sugara, de kisebb, mint az elektronok közepes szabad úthossza,
- r_s a szonda sugara,
- l a hengeres szonda hosszúsága,
- n a kvázistacionáriusnak feltételezett plazma töltéshordozókoncentrációja,
- e az elektron töltése,
- u, v, w a radiális, azimutális és axiális sebesség-komponens,
- $f(u, v)$ a mágneses tér által perturbált eloszlási függvény.

A (10) összefüggés hengeres szonda esetében adja meg a szondán lefolyó áramot. Itt a w sebességkomponens, amely a szondatengely irányába mutat, nem befolyásolja a szondaáramot. Az integráció határait illetően a következő feltételek vezethetők le a töltéshordozók mozgásának analizéséből [14–15]:

$$u^2 \cong \left(\frac{R_0^2}{r_s^2} - 1 \right) \frac{e^2}{4m^2} \left\{ \left[HR_0 - \frac{2mv}{e} \right]^2 - H^2 r_s^2 \right\} + 2 \frac{e}{m} V_s \quad (11)$$

valamint ennek figyelembevételével az azimutális komponensre

$$v_{1,2} = \frac{eHR_0}{2m} \pm \left[\frac{u^2 - 2 \frac{e}{m} V_s}{\frac{R_0^2}{r_s^2} - 1} + \frac{e^2 r_s^2 H^2}{4m^2} \right]^{1/2} \quad (12)$$

ahol r_s a szonda sugara,

V_s a szondának a kisülési térhez (plazmához) képest vett potenciálja.

A képletből látható, hogy $u_1 = 0$, gyorsító szondakörüli térenél,

$$u_1 = - \left(\frac{2eV_s}{m} \right)^{1/2} \quad (13)$$

fékező térben, minden más esetben pedig $u_2 = \infty$. Spiwak és Reichrudel alkalmazta ezt a számítási módot a szondára jutó elektronáram megadásához [15]. Feltételezték ez esetben is a Maxwell–Boltzmann sebességeloszlás teljesülését az

$$\bar{f}(U, V) = \frac{m}{2\pi kT} \exp \left[- \frac{m}{2kT} (u^2 + v^2) \right] \quad (14)$$

alakban, majd ezután az u_1, u_2, v_1, v_2 és az $\bar{f}(u, v)$ -re nyert eredményeket a (10) egyenletbe helyettesítették. Ily módon összefüggést sikerült megállapítani a mágneses tér erőssége, a szondapotenciál és a szondaáram között. Ez az összefüggés igen bonyolult és kevésbé áttekinthető [15].

A kísérletekből, valamint a kvalitatív megfontolásokból és az elméleti levezetésből [14–15] azt mindenesetre egyértelműen meg lehet állapítani, hogy a mágneses tér igen erősen befolyásolja a szondakarakterisztika azon szakaszát, amelynél a szondaáramot túlnyomó részt az elektronáram teszi ki. Az adódott, hogy a növekvő térerősséggel csökken a szondára jutó elektronáram, szondakarakterisztika pedig ellaposodik [14, 15]. Ugyanekkor azonban az ionáram szakasz elég kis sugarú szondák esetén nem befolyásolja számottevően a mágneses tér, tehát a szondamérésnek ezen szakasz kiértékelésére kell mágneses tér jelenlétében korlátozódnia.

Kimutatható [14], hogy a szondaáram az $\frac{eH}{(2mkT)^{1/2}}$ kifejezéssel arányosan változik, azonban elektronokra nézve e változás nagyobb, mint a lényegesen nagyobb tömegű ionok esetében. A részletes diszkussziónál szét kell választani a szonda felületével, vagy tengelyével merőleges, vagy azzal párhuzamos mágneses tér esetét [14–16], azonban a pontos elméleti leírás mindkét esetben nehezen áttekinthető, bonyolult összefüggéseket eredményez. Figyelembe kell ugyanis venni azt is, hogy a mágneses tér nemcsak egy szondakörüli R_0 sugarú tartományban hat, hanem azon kívül is módosítja a töltéshordozók mozgását.

Külső mágneses tér esetén tehát csak a szondakarakterisztika ionáram szakasza kiértékelhető, ha a szonda jellemző geometriai méretei kisebbek, mint az ion ciklotron sugara. Ha ez nem teljesül, úgy más mérési eljárást kell alkalmazni, a szondamérések ez esetben már elvesztik létjogosultságukat.

8. Mikrohullámú szondamérések

Az előzőekben [1] tárgyalásra került néhány olyan szondamérési módszer, amely jól alkalmazható stacioner állapotban levő kisülések vizsgálatánál. A jelen dolgozat keretében szó volt a nem-stacioner és periodikus kisüléseknél alkalmazható néhány speciális szondamérési módszerről, valamint a külső mágneses térben levő stacioner és nem-stacioner kisülések esetén elvégezhető szondamérési vizsgálatokról. Amennyiben a kisülés saját mágneses tere, vagy a külső mágneses tér erőssége egy kritikus értéknél nagyobb, úgy az előzőekben ismertetett korlátozott jellegű szondamérési lehetőség is megszűnik.

Gyakran van olyan eset azonban, amikor szükség van a kisülési jellemzők erős mágneses térben való meghatározására is. Ekkor mikrohullámú szondamérések, zajhőmérséklet mérések, optikai, spektroszkópiai módszerek kerülnek előtérbe, ezek alkalmazásához kell folyamodni [20]. Itt nem kerül sor a módszerek részletes taglalására, csak a mikrohullámú szondamérés rövid ismertetésére.

Jól ismert, hogy a rádióhullámok ionoszférában való terjedésének vizsgálatánál a fellépő jelenségek leírását a dielektrikumelméletből kiindulva végzik [20]. Az ionoszféra felfogható ugyanis egy olyan K dielektromos állandóval rendelkező közegnek, amelynek dielektromos állandóját rádiófrekvenciás szondázás esetén

$$K = 1 - \frac{4\pi \cdot n_e \cdot e^2}{m\omega^2} \quad (15)$$

összefüggés adja, ahol

- n_e az elektronok koncentrációja,
- e az elektronok töltése,
- m az elektronok tömege,
- ω az alkalmazott rádiófrekvenciás tér körfrekvenciája.

A rádiófrekvenciás térre nézve az ionoszféra konstans dielektromos állandójú közegként viselkedik. Kimutatható [20], hogy amennyiben egy alacsonynyomású gázkisülés elektronjainak energiaeloszlása a Maxwell—Boltzmann eloszlást követi, úgy a kisülési tér vezetőképességének imaginárius része

$$\sigma_i = -\frac{en_e^2}{m_i \omega} \cdot \left[1 - k_1 \left(\frac{v_c}{\omega} \right)^2 \right] \quad (16)$$

ahol σ_i a kisülési tér vezetőképességének imaginárius komponense,

v_c az elektronok ütközési frekvenciája, általában $\omega > v_c$ áll,

k_1 numerikus korrekciós faktor.

Ezek alapján világos, hogy a kisülések töltéshordozó koncentrációja mikrohullámú térrel való kölcsönhatás során mérhető. Ezen mikrohullámú szondázás lehetőségeit már 1919-ben *van der Pol* publikálta [21]. Kísérleteinél *van der Pol* a [16] összefüggés alapján számolva, relatív vezetőképesség méréssel határozta meg

a kisülések elektronkoncentrációját [21]. A kisülést Lecher-drótpár közé tette, s a vezetőképességet egy ismert vezetőképességű elektrolittal összehasonlítva határozta meg.

A jelenleg ismeretes modern mikrohullámú szondamérési módszerek [22—59] igen pontos mérési eredményeket szolgáltatnak. Pillanatnyilag a legismertebb módszerek [21—59] az elektronkoncentráció meghatározására szolgálnak. Erre vonatkozóan két lehetőség kínálkozik:

a) Transzmissziós és reflexiós tulajdonságok mérése az egyik lehetséges és általánosan elfogadott, bevált mérési módszer. Itt lényegében az abszorpciós veszteségeket határozzák meg és a fáziseltolást, s ebből következtetnek az elektronkoncentrációra. A méréseknél a vizsgált kisülést hullámvezetőbe teszik, vagy csak a kisülés egy részén engedik át a mikrohullámokat.

b) A másik lehetőség az üregrezonátor rezonanciafrekvenciájában beálló változás meghatározásával ad összefüggést az elektronkoncentráció és a mérhető paraméterek között. Ha ω_0 jelöli az üregrezonátor rezonanciafrekvenciáját, akkor a $\Delta\omega_0$ rezonanciafrekvencia változásra a következő összefüggés adható meg [20]:

$$\frac{\Delta\omega_0}{\omega_0} = \frac{2\pi \cdot e^2 n_e \cdot \sigma}{m_i \omega^2} \cdot G \quad (17)$$

ahol G egy geometriai viszonyoktól függő korrekciós faktor. Így viszonylag gyorsan és egyszerű módon olyan esetekben is megállapítható a vizsgált kisülési tér elektronkoncentrációja, amikor a szondamérési módszerek már nem alkalmazhatók, pl. erős mágneses tér jelenlétében. A mikrohullámú szondamérés független a kisülés jellegétől, s emiatt összevethető a különböző, elfogadott szondamérésekkel végzett vizsgálatok és a mikrohullámú módszerek eredményei. Az irodalmi adatok szerint [20] a nyert eredmények egymással jó egyezést mutatnak.

A mikrohullámú mérésekből nyert elektronkoncentráció értékekből kiindulva további plazmajellemzők megadása is lehetséges, azonban itt esetleg még kiegészítő méréseket kell végezni az előzőekben felsorolt módszerek valamelyikének felhasználásával.

A mikrohullámú szondamérésnél [29—59] alapvető feltételként szerepel, hogy a vizsgált kisülési tartományban az elektronkoncentráció értéke térben konstans. Az eredmények ennek megfelelően az elektronkoncentráció átlagértékét adják. Ez a mikrohullámú szondamérés egyik hátránya. A mikrohullámú szondamérések másik hátránya az, hogy csak olyan esetekben alkalmazható a módszer, ha az elektronkoncentráció értéke 10^6 elektron/cm³-nél nagyobb, de 10^{10} elektron/cm³-t nem haladja meg [20]. Csak ezen elektronkoncentráció tartományban adnak reális eredményt a mérések, amint ez a szondamérésekkel való összevetés révén megadható volt.

Az előzőek során felmerült az a kérdés is, hogy a kisülési térbe behatoló mikrohullámok nem módosítják-e meg a kisülési alapfolyamatokat, s ezáltal nem befolyásolják-e a vizsgálandó jelenségeket [20]. Erre a kérdésre mindeddig konkrét választ nem sikerült adni [20]. Nagymértékben függ e befolyás a mikrohullámú tér energiájától, a kisülés jellegétől, stabilitásától és még néhány mérési feltételtől. Jelen dolgozat szerzőjének véleménye szerint, amennyiben a mikrohullámú tér frekvenciája a kisülés valamelyik karakterisztikus frekvenciájának közelébe esik, úgy majdnem biztosra vehető, hogy a kisülés mint jó hullámvezető reagál a hullá-

mokra, sőt kedvező feltételek mellett erősíti is azokat. Esetenként a rezonancia-tartomány közelében még a töltéshordozók számottevő mértékű átrendeződése is bekövetkezhet.

Nem hanyagolható el tehát az az elővigyázatossági intézkedés, amely a mikro-hullámú szondamérések elvégzése előtt a kisülés zajspektrumának, karakterisztikus rezgési sávjainak és vonalainak feltérképezését teszi szükségessé. A mikrohullámú tér frekvenciáját úgy kell megválasztani, hogy lehetőleg e kritikus értékekkel ne essen egybe, ezektől távol legyen. További fontos szempontot képez a mikrohullámú tér energiájának helyes megválasztása, a jó mérhetőség és a minimális zavar ellen-tétes irányú szempontjainak figyelembevételével.

A mikrohullámú szondázás egyik előnye, hogy gyors mérési módszer, bár bizonyos apparatív felkészültséget ez is feltételez. A módszer legfőbb előnye, hogy alkalmazásakor a kisülési térbe nem kerül be idegen test, s az ilyen módon bekövetkező zavarral ez esetben nem kell számolni.

Gyakran előfordul, hogy a teljes kisülési diagnózis felvétele érdekében több vizsgálati módszert kell alkalmazni. Ilyen esetekben célszerű a méréseknél átfedési területeket is biztosítani, azaz egy-egy jellemzőt két, vagy több módszerrel is lemérni, s az így nyert eredményeket összevetni.

9. Kisülések mágnessterének szondamérésekkel való meghatározása

Az eddig tárgyalt szondamérések a kisülések elektromos paramétereinek, a töltéshordozók tulajdonságainak meghatározására szolgálnak. Nem tartozik ugyan szorosan az eredeti Langmuir-féle szondamérési elvhez a kisülések mágnessterének mágneses szondázással való meghatározása, azonban az általános szondamérési vizsgálatok összevetésénél és tárgyalásánál mindenképp szót érdemel ez a módszer is, amely alapvetően fontos eszköze a plazmadiagnózisnak. Ezért a most következőkben röviden ismertetésre kerül e módszer is.

A mágneses szondamérés ma az egyik legelterjedtebb mérési lehetőség, amelynek segítségével a külső mágneses térben levő kisüléseknél a mágneses tér erőssége meghatározható. Hasonlóképp széles körben kerül alkalmazásra e módszer olyan nagyarányú kisüléseknél, amelyek ugyan nincsenek külső mágneses térben, azonban a kisülés saját mágneses tere már számottevő, a kisülési folyamatokat befolyásolja, s annak meghatározása emiatt feltétlen szükséges. Itt is a kisülési térbe idegen tárgyat, a mérő szondát kell bevezetni, azonban csak az egyes konkrét esetekben lehet ezt megmondani, hogy ez a szonda mennyiben befolyásolja a kisülési viszonyokat. Általános összefüggést, vagy elvi megállapítást erre vonatkozóan még mind- eddig nem sikerült tenni [3].

A mérendő mágneses tér jellegét tekintve e mérések két csoportba sorolhatók, a lassan változó vagy stacioner mágneses terek, és a gyorsan változó mágneses terek mérésére alkalmas vizsgálati módszerekre. A kisülésbe miniatűr tekercset helyeznek, s ennek segítségével történik a mérés. Természetesen a tekercset, ami ez esetben a szondát képezi, a kisülési tértől kellően el kell szigetelni. A térben változó mágneses tér mérésére több szondát szokás alkalmazni, s ezek áramát oszcilloszkopikusan észlelni. Pl. a Zeta vizsgálatánál 16 mágneses szonda volt a kisülési csőfalba be- építve, amelyek radiálisan különböző mélységre nyúltak be [3]. Relatív történt a mágneses tér meghatározása egy nyolcsugaras oszcilloszkóp segítségével.

A szondát képező miniatűr tekercs átmérője általában az 1 mm-t nem haladja meg [3], az alkalmazott menetszám pedig a mérendő mágneses tér várható frekvenciájától függ. Minél több a tekercs menetszáma, annál pontosabb a mérés, annál érzékenyebb a szonda. A tekercs szigetelőcsőbe helyezve nyúlik be a kisülési térbe, s esetenként elektrosztatikus zajcsökkentő elemekkel is el szokták látni [3].

Ha a mágneses tér frekvenciája igen magas (nagyfrekvenciás tér, 1–2 MHz), igen kevés menetszámú tekercset kell szondaként alkalmazni.

Meg kell említeni, hogy a Hall-effektuson alapuló mágneses szondamérést is alkalmazzák esetenként, ennél a tekercs helyett valamely alkalmasan megválasztott félvezető elemet helyeznek a kisülési tér vizsgálandó helyére. Ennek az az előnye, hogy a Hall-effektus nem érzékeny a frekvenciára és így e módszer igen magas frekvenciájú mágnesterek mérésénél is alkalmazható.

A mágneses tér-mérések gyakorlatilag a MHz-es frekvenciával változó mágnesesterek esetében már csak nagyon nehezen végezhetők el. Ez tekinthető a mérések felső határának. 100 MHz-nél már maximálisan 2–5 menetből áll csak a szondaként alkalmazott tekercs [3], s ennek megfelelően nagymértékben csökken a jel/zaj viszony.

Az utóbbi időben kialakult [3] speciális miniatűr szondák segítségével (tekercs-átmérő 1 mm, tekercs menetszám 3–5) ma már 18 Hz-ig ki lehet terjeszteni a méréseket a gondos árnyékolás biztosítása mellett. Kielégítőnek mondható a szonda, ha a plazmában és a plazmán kívüli méréseknél adódó jel/zaj hányadosok viszonya 0,1 körüli érték [3].

Az ilyen módon végzett szondamérések során adódó zavarokra magnetokusztiqus ellenőrző mérésekkel próbáltak következtetni [3], azonban számottevő zavart ilyen módon nem tudtak kimutatni.

Az így, szondázással történő mágneses tér-erősség mérés azonban csak hideg plazmák esetén alkalmazható, forró plazmáknál, más jellegű mérési módszert kell találni.

10. A szondamérések jelentősége, alkalmazhatósága

Az előző részben [1], valamint a jelen dolgozat során tárgyalásra kerültek a fontosabb szondamérési módszerek. Ezek mind bizonyos feltételek mellett alkalmazhatók csak, s nem adható meg olyan módszer, amely minden kisülési típusnál egyaránt alkalmazható lenne. Mint erről az előzőekben már szó volt, általában a szondamérések kombinált alkalmazása vezet csak a teljes plazmadiagnózis felvételéhez.

A szondamérések rendkívüli elterjedtsége, azok egyszerűsége, gyorsasága és sokirányú alkalmazhatósága miatt van. A mérések során kiküszöbölhetetlen, állandó zavart képez a kisülési térbe (plazmába) behelyezett idegen tárgy, amellyel, mint zavarforrással a szondaméréseknél számolni kell. Azonban, ha figyelembe vesszük a többi vizsgálati módszereket, azoknál is általában fellep valamilyen zavaró körülmény, amely a mérési módszer kiküszöbölhetetlen velejárója. Ugyanakkor szondamérésekről nyugodtan el lehet mondani, hogy kisüléseknél és hideg plazmáknál a legszélesebb körben alkalmazható és legtöbb információt nyújtó vizsgálati módszer, amely eredeti elvét, formáját I. Langmuirnak köszönheti.

IRODALOM

- [1] Bitó J., Magyar Fizikai Folyóirat, 14, 1966.
- [2] I. Langmuir, Memorial Volumes IV. (Electrical Discharge). Guy Suits. Pergamon Press. 1961.
- [3] В. Д. Рusanov: Современные методы исследования плазмы. Госатомиздат. 1962.
- [4] Bitó J., Szemző I., Magyar Fizikai Folyóirat, 12, 121, 1964.
- [5] M. J. Druyvesteyn, Z. Physik, 64, 781, 1930.
M. J. Druyvesteyn, Phys. Z. 33, 856, 1932.
R. H. Sloane, E. I. R. MacGregor, Phil. Mag. 18, 193, 1934.
- [6] E. Nölle, Ann. Phys. 6. 18, 328, 1956.
- [7] R. A. Ledrus, Bull. Acad. Roy. Belg. Cl. Sci. 123, 1938.
R. A. Ledrus, R. Neiryneck, A. C. E. C. Charleroi-Jeumont. 3—4. 141, 1941.
R. A. Ledrus, Appl. Sci. Res., Sec. B. 5, 151, 1955.
- [8] I. Fajt, I. Koncz, Előadás a Balatonvilágosi Gázkisülései Kollokviumon 1958. Balatonvilágosi.
- [9] G. Lakatos, J. Bitó, Acta Phys. 13, 271, 1961.
G. Lakatos, J. Bitó, HIKI Közlemények, 2 11, 1963.
- [10] J. F. Waymouth, J. Appl. Phys. 30, 1404, 1959.
- [11] J. Bitó, I. Szemző, Acta Technica Hung. Közlés alatt.
- [12] G. Lakatos, J. Bitó, Előadás az Elektron és Vákuumfizikai Szimpóziumon, Balatonföldvár, 1962.
- [13] J. Bitó, Acta Phys. Hung. 16, 275, 1963.
Bitó J. Magyar Fizikai Folyóirat, 12, 111, 1964.
- [14] W. L. Granowski: Der elektrische Strom im Gas. I, II. Akademie Verlag Berlin, 1955.
- [15] Г. В. Спивак, Е. М. Реухрудель, ЖЭТФ 6 816, 1936;
Г. В. Спивак, Е. М. Реухрудель, Изв. Ак. Наук. 4, 479, 1938;
Г. В. Спивак, Е. М. Реухрудель, ЖЭТФ 5, 715, 1938.
- [16] Д. А. Франк—Каменецки: Плазма — четвертое состояние вещества Госатомиздат. Москва, 1961.
- [17] S. E. Segre et al., J. Sci. Instr., 37, 369, 1960.
- [18] S. Berglund et al., J. Sci. Instr. 40, 250, 1963.
- [19] W. Kluge, W. Thielo, Előadás az ionizált gázok jelenségeivel foglalkozó V. Nemzetközi Konferencián. München, 1961.
- [20] S. Flügge, Handbuch der Physik XXII. Gasentladungen 2. Springer Verlag, Berlin. 1956.
- [21] B. van der Pol., Phil. Mag. 38, 252, 1919.
- [22] J. Slater, Rev. Mod. Phys. 18, 473, 1946.
- [23] H. Morgenuau, Phys. Rev. 69, 508, 1946.
- [24] R. Kerr et al., MIT Techn. Rep. 140. Oct. 1949.
- [25] M. A. Biondi, Rev. Sci. Instr. 22, 500, 1951.
- [26] W. Eckhardt et al., Z. angew. Phys. 6., 246, 1954.
- [27] M. A. Lampert et al., Electr. Comm. 30, 124, 1954.
- [28] H. A. Дуенертов, Г. М. Памеюк, ЖЭТФ 28, 343, 1955.
- [29] H. Czyzewski, J. Appl. Phys. 22, 846, 1951.
- [30] M. Pahl, U. Weimer, Z. Naturf. 13a, 745, 1958.
- [31] N. Sicha, V. Vesely, Czechosl. J. Phys. 8, 257, 1958.
- [32] J. G. Clouston, et al, Nature 181, 1325, 1958.
- [33] C. B. Wharton, D. M. Slager, J. Appl. Phys. 31, 428, 1960.
- [34] M. O. Stern, E. M. Dacus, Rev. Sci. Instr. 32, 140, 1961.
- [35] А. И. Анисимов и др.: ЖТФ, 30, 1009, 1960.
- [36] K. Takayama, et al. Phys. Rev. Letters 5, 238, 1960.
- [37] R. V. Williams et al, Proc. Phys. Soc. 85, 239, 1960.
- [38] Kaufman, R. V. Williams, Proc. 4th Int. Conf. Ion Phen. in Gases Uppsala 1959. North-Holland, 1960.
- [39] А. Н. Зайдель и др. ЖТФ 31, 129, 1961.
- [40] J. K. Wright, et al, Proc. Phys. Soc. 78, 1439, 1961.
- [41] S. Takeda, M. Roux, J. Phys. Soc. Japan, 16, 95, 1961.
- [42] T. Consoli, M. Dagai, Proc. 5th Int. Conf. Ion. Phen. in Gases Munich 1961. North-Holland. a. 23. 1961.

- [43] *G. Lisitano, M. Tutter, Z. Naturforschung 16a, 692, 1961.*
- [44] *G. Bekefi, S. C. Brown, J. Appl. Phys. 32, 25, 1961.*
- [45] *G. E. Stewart, Z. A. Kaprielian, Proc. 5th Int. Conf. Ion. Phen. in Gases. Munich 1961. North-Holland a 32. 1961.*
- [46] *Ш. М. Левимский, З. А. Пляцок, Приборы и Техники эксперимента 150, 1961.*
- [47] *R. D. Medford, et al, Proc. 5th Int. Conf. on Ion. Phen. in Gases. Munich 1961. North-Holland Co. 2000, 1961.*
- [48] *K. B. Persson, J. Appl. Phys. 32, 2631, 1961.*
- [49] *H. Schindler, Z. angew. Phys. 14, 538, 1962.*
- [50] *C. W. Davidson, W. E. J. Farvis, Phys. Rev. 127, 1858., 1962.*
- [51] *K. Wojacek, Beiträge aus der Plasmaphysik 179, 1962.*
- [52] *H. Hess et al. Beiträge aus der Plasmaphysik 171, 1962.*
- [53] *W. Neumann, Beiträge aus der Plasmaphysik 80, 1962.*
- [54] *K. M. Burrows, Australian J. of Phys. 15, 162, 1962.*
- [55] *T. Dote et al, J. Phys. Soc. Japan, 17, 174, 1962.*
- [56] *H. Hermansdorfer et al, Z. Naturforschung 18a, 1361, 1963.*
- [57] *T. B. Read, British J. Appl. Phys. 14, 36, 1963.*
- [58] *F. W. Crawford, et al, J. Appl. Phys. 34, 2186, 1963.*
- [59] *E. Wagner, Wissenschaftliche Zeitschrift der Technischen Universität, Dresden 13, 209, 1964.*

PROTON-EMISSIONSAL JÁRÓ RADIOAKTÍV ÁTALAKULÁSOK*

DARÓCZY SÁNDOR

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen

I. Bevezetés

Már *Rutherford* idején felmerült a gondolat az erősen protongazdag magok proton-emisszió útján történő radioaktív átalakulásának lehetőségéről. Annak magyarázata, hogy az első próbálkozás p -radioaktív mag kísérleti előállítására mégis csak 1949-ben történt meg, nyilván technikai okokban keresendő. *Alvarez* [1], *Barkas* [2] elméleti vizsgálataira támaszkodva, arra a következtetésre jutott, hogy a N^{12} a p -bomlással szembeni stabilitás határán van. A $C^{12}(p, n)N^{12}$ reakcióban előállított N^{12} azonban nem mutatott p -radioaktivitást: az utolsó proton B_p kötési energiája $+0,185$ MeV-nek adódott. Tovább folytatva a kutatást, *Alvarez* [3] a számításai szerint késleltetett p -emitter Ne^{17} , O^{13} és C^9 magokat igyekezett előállítani nagy energiája protonokkal létrehozott magreakciókban. Kísérletei ebből a szempontból eredménytelenek maradtak, annak ellenére, hogy a B^8 , N^{12} és Na^{20} új, késleltetett α -emitterek felfedezésére vezettek. A p -radioaktivitás szempontjából hasonlóan eredménytelenek maradtak *Birge* [4] ill. *Breckon* és munkatársai [5] kísérletei is, jóllehet ezek is új, részben késleltetett α -részeket emittáló izotópok, az Al^{24} , P^{28} és Cl^{32} felfedezését eredményezték. Ugyanekkor *B. Dzselepov* [6] az ismert magtömeg-adatok alapján elméleti számításokat végzett a magasabbrendű ismeretlen neutronszegény tükörmagok tömegére, ill. a bennük levő utolsó proton kötési energiájára vonatkozóan. Ezek alapján felvetette az alapállapotból történő p -bomlás lehetőségét, s a $Z = 2 - 20$ rendszám tartományban megadta az alapállapotból végbemenő p -bomlással szembeni stabilitás határán (a következőkben: p -stabilitási határ) fekvő izotópokat.

A fenti vizsgálatokkal a p -radioaktivitás kísérleti és elméleti kutatásának első szakasza lezárult. A második szakasz az 50-es évek végén kezdődött, s ma is tart. Kezdetben a p -bomlás különböző lehetséges mechanizmusaira vonatkozó részletesebb elméleti munkák láttak napvilágot. A 60-as évek elején azután a kísérleti fizikusok munkáját is siker koronázta: különböző laboratóriumokban felfedezték az O^{13} , Ne^{17} , Mg^{21} , Si^{25} és Kr^{72} késleltetett p -emitter magokat. Ezekkel együtt ma már több mint 10 késleltetett p -bomló izotópot ismerünk. Kétségtelen, hogy ezekben a sikerekben döntő szerepet játszottak a magfizikai kutatás kísérleti technikájában újabban elért óriási eredmények (igen nagy energiájú p - és nehéz töltött ion-gyorsítók, félvezető detektorok, stb).

* Érkezett 1965. VIII. 27.

II. Neutronszegény izotópok

II. 1. Az ismert neutronszegény izotópok általános tulajdonságai

Nyilvánvaló, hogy a p -radioaktív izotópokat, bármilyen legyen is a p -bomlás mechanizmusa, az erősen neutronszegény (protongazdag) izotópok között kell keresnünk. Már maga ez a tény indokolja, hogy kissé részletesebben is áttekintsük tulajdonságaikat.

Bármely elem neutronszegény izotópjainak az illető elem legkönnyebb stabil izotópjánál könnyebb, radioaktív izotópjait tekintjük. Ezek között vannak olyanok, amelyeknél $Z > N$ (könnyű magok tartománya), és olyanok, amelyeknél $Z \leq N$ (közepes és nehéz magok tartománya). A ma ismert legtöbb alapállapotú neutronszegény izotóp β^+ -bomlás, pályaelektronbefogás és α -bomlás, továbbá ezek bármilyen lehetséges kombinációja révén alakulhat át eggyel ill. kettővel alacsonyabb rendszámú, stabil vagy radioaktív atommagba, csökkentve ezzel az instabilitását eredményező nagy Coulomb-energiát. Minél könnyebb egy elem neutronszegény izotópja, általában annál nagyobb a β^+ -bomlásra (és/vagy az ε -befogásra) rendelkezésre álló energia, s ennél fogva annál kisebb az átalakulás felezési ideje. Az α -bomlásra rendelkezésre álló energiákra és a fellépő felezési időkre vonatkozóan már nem tehetünk ilyen általános kijelentéseket. A p -radioaktivitás szempontjából nagy jelentőségű az utolsó proton kötési (vagy szeparációs) energiája. Erre vonatkozóan ismét általában igaz, hogy ha az elemek NZ -síkjában ábrázolt legkönnyebb stabil izotópjától balra haladunk, akkor az utolsó proton kötési energiája csökken. Csak megjegyezzük, hogy ugyanekkor az utolsó neutron kötési energiája általában enyhén növekedik.

II. 2. Az ismeretlen neutronszegény izotópok alapállapotbeli tulajdonságainak megbecslésére szolgáló módszerek

Ha a jelenleg ismeretlen neutronszegény izotópok várható tulajdonságait szeretnénk megbecsülni, akkor számos lehetőség áll rendelkezésünkre. Ilyenek pl. a kísérleti adatok alapján szerkesztett különböző rendeltetésű magszisztematikák, a félempirikus tömegformula, a kísérleti adatok extrapolációja stb. A magszisztematikák segítségével csupán az elemek legnehezebb ismeretlen neutronszegény izotópjainak tulajdonságait becsülhetjük meg. A félempirikus tömeg-formula használata, csakúgy, mint a kísérleti adatok extrapolációja, lehetőséget ad a könnyebb ismeretlen izotópok tulajdonságainak megjósolására is. Ezek alkalmazhatósága azonban a könnyű magok tartományában — a magtulajdonságokban fellépő nagyfokú ingadozások miatt — erősen problematikus. Már ennyiből is látszik, hogy az ismeretlen neutronszegény izotópok tulajdonságainak megbecslésére igyekeznünk kell a legalkalmasabbnak látszó módszert felhasználni. Így nem csupán a becslések pontosságát növelhetjük, de elkerülhetjük a súlyosabb tévedéseket is.

Az ismeretlen neutronszegény izotópok kutatása kezdettől fogva szorosan összekapcsolódott a p -stabilitási határ elhelyezkedésének vizsgálatával. B. Dzseleпов [6] alapvető számításai után, melyről a bevezetésben már szóltunk, Karnauhov és Tarantyn [7, 8] számos, a $Z = 7 - 53$ tartományba eső elem izotópjaira meghatározták a p -stabilitási határt, majd az így nyert értékek alapján interpoláltak a közbeeső Z -értékekre. A fenti rendszám-tartományra így módon nyert p -stabilitási határ nem csupán az interpoláció, hanem az egyes elemek p -stabilitási határának megha-

tározására használt módszerek (a kísérleti B_p -értékek extrapolációja és a félempirikus tömeg-formula) miatt is meglehetősen közelítő jellegű.

A becslések pontosságának finomítása elsősorban a $Z > N$ rendszámú izotópoknál, azaz a könnyű magok tartományában látszott megvalósíthatóknak. Baz' [9] és Zel'dovics [10] az $A < 40$ tartományban még csak ~ 20 új, β^+ -aktív, de a p -stabilitási határon belül (azaz attól jobbra) elhelyezkedő izotóp létezésének lehetőségére mutatott rá. Gol'danskijnak [11, 12] már ~ 100 új, az előbbiekhöz hasonló izotóp létezését sikerült megjósolnia a $Z \leq 40$ tartományban. Az új izotópok tömegének, utolsó protonjuk és neutronjuk kötési energiájának, β^+ -bomlási energiájuk és felezési idejük kiszámításán túlmenően Gol'danskij a fenti rendszám-tartományban pontosan meghatározta a p -stabilitási határ elhelyezkedését. A $Z \leq 14$ tartományra legújabbban Jänecke [13] végzett az előzőekhez hasonló, de sokkal részletesebb számításokat. Az új izotópok tulajdonságainak megbecslésében a [9–13] munkákban alapvető szerepet játszanak azok a számítások, amelyek a magerők töltésfüggetlenségén alapulnak. A következőkben ezeket szeretnénk röviden ismertetni, annál is inkább, mivel eredményességüket a könnyű magok tartományában ma már kísérleti tények is igazolják.

A töltésinvariancia következményeinek egyike: analóg energiaszintek létezése az izobár magokban (pl. a tükörmagok vagy az izobár-triplettek energiaszintjei). Az ilyen nívók, amelyek azonos A tömeg-, de különböző Z proton- és N neutronszámú magoknál figyelhetők meg, azonos tulajdonságokkal (impulzusmomentum, paritás, izospin, stb.) rendelkeznek. Két izotopikusan adjungált izobár mag (az (A, Z_1, N_1) magot az (A, Z_2, N_2) maghoz izotopikusan adjungáltnak nevezzük, ha $Z_1 = N_2$ és $N_1 = Z_2$) két tetszőleges analóg állapotának (így pl. alapállapotának) energiája csak a szóban forgó magok Coulomb-energiájában és a megfelelő $n-p$ tömegkülönbségben különbözik [14]. Felhasználva azt, hogy ezeket a korrekciókat könnyű kiszámítani, meg lehet állapítani számos $Z > N$ -ű izotóp alapvető tulajdonságait az $N > Z$ -ű izotópok ismert tulajdonságai alapján.

Az alapállapotú (A, Z, N) vagy röviden (A, Z) mag teljes energiája:

$${}_Z M_N^A c^2 = E^A(T) + E_c(A, Z) + (Zm_p + Nm_n)c^2, \quad (1)$$

ahol $E^A(T)$ a mag nukleonjai között ható specifikus magköölcsönhatási energia, $E_c(A, Z)$ a protonok Coulomb-kölcsönhatási energiája, m_p és m_n pedig a proton és a neutron tömege. A magerők töltésinvarianciája miatt $E^A(T)$ csak a tekintett mag tömegszámától és alapállapotának izospinjétől függ. $E^A(T)$ rendszerint növekszik T növekedésével. Ezért az alapállapotnak — adott A és Z esetén — a lehetséges T -értékek közül a minimális, azaz a $T = \frac{|Z - N|}{2}$ érték felel meg. E szabály alól

az $A \geq 34$ tömegszámú $pn - pn$ magok képezhetnek kivételt, amelyeknél előfordulhat, hogy $E^A(0)$ 0,1–0,3 MeV-el nagyobb, mint $E^A(1)$ [14]. A teljes energiának ez a része nem változik, ha az (A, Z) mag helyett annak izotopikusan adjungált $(A, A - Z)$ magját tekintjük. A Coulomb-energia első közelítésben:

$$E_c(A, Z) \approx Q \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}, \quad Q \approx 0,6 \text{ MeV}, \quad (2)$$

és nem egyéb, mint Z proton elektrosztatikus kölcsönhatásának energiája; minden egyes proton $(Z-1)$ fentmaradó protonnal lép kölcsönhatásba. A Q koefficiens értéke megfelel annak a feltételezésnek, hogy a protonok egyenlő valószínűséggel oszlanak el egy $R \approx 1,45 A^{1/3} \cdot 10^{-13}$ cm sugarú gömb belsejében, azaz annak valószínűsége, hogy egy proton a tér egy adott pontjában található, nem függ a többi proton helyzetétől. A (2) kifejezés ezen feltételezések mellett a Coulomb-energia középértéke, s mint ilyen, közelítő jellegű; ezért természetes, hogy a benne szereplő Q koefficiens a magenergia-adatok alapján, empirikusan kell megválasztani.

Mint látható, az (1)-ben szereplő második tag nehézség nélkül kiszámítható, a harmadik tag pedig ismert. Így lehetővé válik a kísérletileg ismert ${}_Z M_N^A$ tömegből kiszámítani az $E^A(T)$ energia-tagot, és azután ennek segítségével meghatározni az izotopikusan adjungált ${}_N M_Z^A$ mag tömegét. Ily módon a töltésinvariancia lehetőséget ad az (A, Z) ($Z > N = A - Z$ -jú) neutronszegény mag teljes energiájának meghatározására, ha ismert az $(A, A - Z)$ mag tömege. A töltésinvarianciából következik továbbá, hogy az (A, Z) és $(A, A - Z)$ magok hullámfüggvényei a neutronok és protonok (ill. fordítva) felcseréléséig terjedő pontossággal azonosak. Ezért mindkét mag nagyon hasonló tulajdonságokkal rendelkezik; az egyik ismert tulajdonságai alapján meg lehet jósolni a másik tulajdonságait.

Ezeket az egyszerű megfontolásokat elsősorban a könnyű magoknál ($A < 50$) lehet alkalmazni, ahol a Coulomb-energia még kicsi a magenergiához képest, és ahol emiatt még lehet használni a töltésinvariancia és az izospin fogalmát.

A kísérleti adatok analízisének az (1) formula helyett kényelmesebb használni a nukleonok kötési energiájára vonatkozó, *Goł'danszkij* [11, 12] által levezetett formulát. Ha $B_n(A, Z)$ - és $B_p(A, Z)$ -vel jelöljük a neutron és a proton kötési energiáját az (A, Z) magban, akkor (1)- és (2)-ből következik, hogy az (A, Z) magban levő Z -ik proton kötési energiája a következő módon fejezhető ki az izotopikusan adjungált $(A, A - Z)$ magban levő Z -ik neutron kötési energiájával:

$$B_p(A, Z) = B_n(A, A - Z) - \Delta B_{np}, \quad (3)$$

ahol

$$\Delta B_{np} \approx 1,2 \frac{Z-1}{(2Z-1)^{1/3}} \text{ MeV}. \quad (4)$$

Figyelemre méltó, hogy ΔB_{np} A -tól és N -től független. Ezért egy adott elem valamennyi izotópjánál ugyanazon értéket lehet használni. Könnyen belátható, hogy ΔB_{np} közel egyenlő a $(2Z, Z)$ páros önadjungált magban levő neutron és proton szeparációs energiájának ΔB_0 különbségével:

$$\Delta B_{np} \approx \Delta B_0 = B_n(2Z, Z) - B_p(2Z, Z). \quad (4')$$

Felhasználva a (3), (4) és (4') kifejezéseket, valamint az $N > Z$ -jú magok B_n kötési energiájára vonatkozó nagyszámú kísérleti adatot, meg lehet határozni a $Z > N$ -ű, adjungált magok B_p kötési energiáját. Ezáltal meg lehet állapítani, hogy melyek azok a magok, amelyek még stabilisak a p -emisszióval szemben, azaz a p -stabilitási határon belül fekszenek. $Z > N$ esetén a p -stabil magok minden más nehéz részecske (n, α , stb.) emissziójával szemben is stabilisak, mivel ebben a tartományban a p -emissziós küszöb fekszik a legalacsonyabban.

(1)- és (2)-ből közvetlenül következik, hogy az izotopikusan adjungált magok β^\pm -bomlási energiájának maximális értékei között az alábbi összefüggés áll fenn:

$$E_{\beta^+}(A, Z) - E_{\beta^-}(A, A - Z) \approx \left(1,2 \frac{A-1}{A^{1/3}} - 2,6 \right) \text{ MeV}, \quad (5)$$

ahol $2,6 \text{ MeV} = 2(m_c + m_n - m_H)c^2$. Az (5) összefüggés és az ismert E_{β^-} -értékek alapján az ismeretlen E_{β^+} -értékek elég jól megbecsülhetők.

A β^+ -bomló neutronszegény magok felezési idejének megbecslésére a bomlási energián kívül szükség van az izotopikusan adjungált neutrongazdag magok kísérletileg ismert, megfelelő lg ft-értékére [15] is. (Az ft-értékeket a hullámfüggvények alakja határozza meg, ezért a töltésinvariancia elve alapján érthető, hogy az adjungált magok egy-típusú átmenetei esetén az ft-értékeknek azonosaknak kell lenniük.) E kettő ismeretében a β^+ -bomlás felezési ideje grafikusan megbecsülhető [16].

A β^+ -bomlási felezési idők analízisének tekintetbe kell venni még egy körülményt: az izospin-változással nem járó, ún. kedvezően megengedett átmenetek [15] lehetőségét. (Kedvezően megengedett átmenet az (A, Z) és $(A, Z-1)$ magok két analóg állapota között jöhet létre, ilyenkor lg ft értéke minimális, $\sim 3,5$, mivel az ilyen átmenetnél gyakorlatilag nem történik változás a mag hullámfüggvényében.) E kérdést Gol'danskij legújabb munkája [17] alapján tisztázhatjuk.

Az ${}_Z M_N^A \beta^+ \rightarrow {}_{Z-1} M_{N+1}^A$ átalakulás teljes energiája (1) és (2) felhasználásával:

$$Q_{\beta^+} \approx E^A \left(T = \frac{|Z-N|}{2} \right) - E^A \left(T = \frac{|(Z-1)-(N+1)|}{2} \right) + \\ + Q \frac{2(Z-1)}{A^{1/3}} - (m_n - m_p)c^2, \quad (6)$$

ahol a megfelelő jelöléseket már ismerjük. (6) alapján könnyen belátható, hogy a $Z > N$ -ű neutronszegény magok β^+ -bomlásánál a leánymag alapállapotának vagy eggyel kisebb, vagy ugyanaz lesz az izospin-értéke, mint az anyamag alapállapotáé. Mivel tehát $T_{\text{anya}} \cong T_{\text{leány}}$, ezért $E^A(T_{\text{anya}}) \cong E^A(T_{\text{leány}})$. Innen azonnal következik, hogy valamennyi $Z > N$ -ű izotóp esetén energetikailag lehetséges a kedvezően megengedett β^+ -bomlás, melynek teljes energiája:

$$Q_{\beta^+}(\Delta T = 0) \approx Q \frac{2(Z-1)}{A^{1/3}} - (m_n - m_p)c^2; \quad (6')$$

ez az energia Q_{β^+} minimális lehetséges értéke. [A konkrét számításoknál inkább használatos a kedvezően megengedett β^+ -bomlás maximális energiája:

$$E_{\beta^+}(\Delta T = 0) \approx \left(1,2 \frac{Z-1}{A^{1/3}} - 1,8 \right) \text{ MeV}, \quad (5')$$

ahol $1,8 \text{ MeV} = c^2(2m_c + m_n - m_H)$.] A $Z > N$ -ű izotópok esetén tehát mindig kell hogy $Q_{\beta^+} \cong Q_{\beta^+}(\Delta T = 0)$ legyen, annak ellenére, hogy a magtömeg-táblázatok számításból kapott adatai alapján nem egyszer $Q_{\beta^+} < Q_{\beta^+}(\Delta T = 0)$.

A kedvezően megengedett átmenet energetikai lehetősége nem mindig jár együtt azzal, hogy ez az átmenet túlsúlyba kerül az alapállapotba történő átmenettel szemben. A legkönnyebb magok esetén a kedvezően megengedett átmenetek — az energiák kicsinsége miatt — elég lassúak, ezért elsőrendű szerepet gyakrabban az alapállapotba történő átmenetek játszanak. $Z \cong 20$ -tól kezdve azonban gyakorlatilag az összes $Z > N$ -ű neutronszegény izotóp izospin-változással nem járó β^+ -bomlás, majd ezt követően γ -sugárzás révén csökkenti nagy Coulomb-energiáját. (5) és (5') alapján a γ -sugárzás energiája:

$$E_\gamma = E_{\beta^+} - E_{\beta^+}(\Delta T=0).$$

A β^+ -bomlási felezési idők megbecslését a $Z > N$ tartományban tehát a következő sorrendben végezhetjük el: 1. (5) és (5') alapján kiszámítjuk az energiákat, 2. megállapítjuk, hogy a β^+ -átmenet az alap- ill. analóg állapotot favorizálja-e, 3. meghatározzuk a tiltottság fokát, 4. az energia és a tiltottság ismeretében kiértékeljük a felezési időt.

A $Z \cong N$ rendszámú ismeretlen neutronszegény izotópok tulajdonságainak megbecslésére eddig csak *Karnauhov és Tyer-Akopjan* [18] végzett számításokat. A számításokhoz szükséges magtömeg-értékeket a *Cameron* [19] által korrigált félempirikus formula alapján készített táblázatból [20] vették. A p -bomlás lehetséges mechanizmusait, a p -stabilitási határ elhelyezkedését, valamint a β^+ - és α -bomlás részéről fenyegető konkurencia lehetőségét tanulmányozták. Kiderült, hogy a bizmutig terjedően valamennyi elem számos neutronszegény izotópja radioaktív bomlásának legvalószínűbb formája a p -bomlás, azaz ezen bomlásfajtának nagyon elterjednek kell lennie. Bár ezek a számítások nem nagy pontosságúak, a segítségükkel levont kvalitatív következtetések feltétlenül helytállóak. Egyrészt ezért, másrészt azért, mert a [18]-ban végzett számítások során a szerzők a kísérleti megfigyelhetőség szempontjait is tekintetbe vették, a későbbiekben még visszatérünk ezen számítások eredményeinek részletesebb ismertetésére.

A legújabb kísérleti kutatások [21, 22] megbízható alapot nyújtanak a töltésinvariancia elvének és az izospin fogalmának a $Z \cong N$ tartományban való alkalmazására is, legalább $Z=40$ - és $A=90$ -ig. Ezek alapján *Gol'danskij* [17] szerint a $Z \cong N$ tartományban kedvezően megengedett β^+ -bomlás csak az $A \cong 34$ tömegszámú $pn-pn$ magoknál lehetséges, amelyeknél — mint említettük — előfordulhat, hogy $E^A(0) > E^A(1)$. (6) alapján ugyanis könnyen belátható, hogy $Z \cong N$ esetén általában $T_{\text{anya}} < T_{\text{leány}}$, azaz $E^A(T_{\text{anya}}) < E^A(T_{\text{leány}})$, ezért a kedvezően megengedett β^+ -bomlás energetikailag tiltott. Ha azonban az anyamag alapállapotának izospinje nagyobb, mint első gerjesztett állapotáé ($pn-pn$ magok), akkor $T_{\text{anya}} = T_{\text{leány}}$, s így energetikailag lehetségessé válik kedvezően megengedett β^+ -bomlás. A $Z \cong N$ -ű izotópok esetén tehát mindig kell hogy $Q_{\beta^+} \leq Q_{\beta^+}(\Delta T=0)$ legyen, annak ellenére, hogy a magtömeg-táblázatok adatai alapján nem egyszer $Q_{\beta^+} > Q_{\beta^+}(\Delta T=0)$.

A töltésinvariancia elvének és az izospin fogalmának a közepes magok tartományára való kiterjesztése nyilvánvalóan azzal jár, hogy az új neutronszegény izotópok tömegének, utolsó protonjuk és neutronjuk kötési energiájának, β^+ -bomlási energiájuk és felezési idejük kiszámítására a $Z > N$ tartományban elmondottak változatlanul érvényesek. Különbség csak a kedvezően megengedett β^+ -átmenetek energetikai lehetőségében áll fenn.

Az $A > 100$ tömegszámú, ismeretlen nehéz magok várható tulajdonságainak megbecslésére csak az ezen fejezet elején ismertetett félempirikus módszerek állnak rendelkezésünkre, melyeknek pontossága valószínűleg elmarad a töltésinvariancia elvén alapuló módszer pontossága mögött. Ez azonban nem jelenti azt, hogy ezek a módszerek, akár kvantitatív becslésekre is, teljesen alkalmatlanok lennének.

II. 3. Az erősen neutronszegény izotópok előállítására szolgáló magreakciók

Erősen protongazdag magokat a legegyszerűbben legkönnyebb izotópjukra dúsított target-elemek töltött részekkel történő bombázásával lehet előállítani. A létrejövő magreakciók közül protongazdag magok előállítására leghatásosabbak a neutronok elpárolgásával járó magreakciók. Ezek relatíve nagy hatáskeresztmetszetűek, mivel a Coulomb-gát csak a töltött részek kirepülését igyekszik megakadályozni. Ilyen reakciók lehetnek pl. a (p, xn) , (d, xn) , (He^3, xn) és (α, xn) reakciók, ahol $x = 1, 2, 3, \dots$. Természetesen x növekedésével csökken a reakció hatáskeresztmetszete. A könnyű magok tartományában, ahol a Coulomb-gát kicsi, a nyitott töltött-részecske-csatornák miatt ez a csökkenés sokkal rohamosabb, mint a közepes és nehéz magok tartományában. Ezen magreakciók hatáskeresztmetszetére *Karnauhov* és *Tarantjin* [8] valamint *Gol'danszkij* [23], a reakció-küszöb-értékekre számos szerző [6, 8, 13, 23, 24] közölt számításokat.

Nyilvánvaló, hogy a fenti magreakciók csak a könnyű magok tartományában alkalmasak olyan, könnyű neutronszegény izotópok előállítására, amelyek már a p -stabilitási határ közelében helyezkednek el. A közepes, de különösen a nehéz magok tartományában, erre a célra kizárólag a többszörösen töltött nehéz ionokkal létrehozott magreakciók alkalmasak.

A nehéz ionokkal létrehozott magreakciók durván két csoportba sorolhatók: 1. különböző nukleon-átadási és 2. közbenső mag keletkezésével járó reakciók. Ha A_1 -gyel jelöljük a bombázó ion, A_2 -vel a bombázott target tömegét, akkor a nukleon-átadási reakciókban keletkező végmagok tömegspektruma két széles csúcsot tartalmaz: az első maximuma A_1 -nél, a másodiké pedig A_2 -nél van (ha $A_2 > A_1$). A közbenső mag keletkezésével járó magreakciók végmagjainak tömegspektruma egy széles csúcsból áll, melynek maximuma $(A_1 + A_2 - x)$ -nél van, ahol x az adott bombázó energiánál elpárolgó nukleonok legvalószínűbb száma. Elegendően nehéz targetek használatánál a reakciócsatornák egyike a maghasadás lesz; ilyenkor a tömegspektrumban megjelenik egy új csúcs $\sim \frac{1}{2}(A_1 + A_2)$ -nél. Természetesen léteznek összetett folyamatok is, mint pl. nukleonok átadása úgy, hogy a mag gerjesztett állapotban marad és energiáját nukleonok párolgása révén veszíti el. Az összetett folyamatok a tömegspektrumban folytonos átmenetet biztosítanak az előbb említett csúcsok között.

Már ez a leegyszerűsített, kvalitatív kép is meggyőz bennünket arról, hogy a nehéz ionokkal létrehozott magreakciók mechanizmusai között megtalálhatók mindazok a reakció-mechanizmusok, amelyeket valamennyi könnyű bombázó részecske felhasználásával valaha is tanulmányoztak.

A nehéz ionokkal létrehozott magreakciók részletesebb diszkussziójára itt nem térhetünk ki, csak utalunk *Fljorov* és *Karnauhov* [25] összefoglaló munkájára.

A nehéz ionokkal létrehozott magreakciók bármely mechanizmusa révén keletkezhetnek igen könnyű, p -bomló neutrondeficités izotópok. A hatáskeresztmetszetek az energiától és a konkrét reakció-mechanizmustól függnek, s értékük igen széles

határok között változhat. A p -bomlás irodalmában eddig csak a közbenső magon keresztül lejátszódó magreakciók hatáskeresztmetszetének megbecslésére szolgáló számítások láttak napvilágot [8, 23]. A közbenső-mag-mechanizmusú magreakciók közül számunkra azok a legfontosabbak, amelyek neutronok tömeges, kaszkád-szerű emissziójával járnak. Az ilyen reakciókat tiszta párolgási reakcióknak nevezik. A tiszta párolgási reakciók legjellemzőbb sajátága, hogy gerjesztési függvényük egy jól meghatározott bombázó energiánál maximumot mutat: a hatáskeresztmetszet az energia növekedésével kezdetben nő, majd a maximumon áthaladva majdnem szimmetrikusan csökken. A hatáskeresztmetszet értéke a maximumban (σ_{\max}) a magreakciók statisztikus elmélete alapján számítható ki [8, 23]:

$$\sigma_{\max} = \sigma_c \prod_{i=0}^{x-1} \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha} \right)_i P(E, x),$$

ahol x a reakcióban emittált neutronok száma, σ_c a közbenső mag keletkezésének hatáskeresztmetszete E bombázó energiánál, Γ_n , Γ_p és Γ_α a közbenső mag adott nivójának neutron, proton és α -rész emissziójára vonatkozó parciális szélessége és $P(E, x)$ annak valószínűsége, hogy a közbenső mag x neutron elpárolgása után elveszti gerjesztési energiáját. Az i index egyrészt a primer közbenső magot ($i=0$); másrészt az 1, 2, ..., $(x-1)$ neutron emissziója után keletkező újabb közbenső magokat jellemzi.

A $\frac{\Gamma_n}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha}$ mennyiséget szintén a statisztikus modell segítségével lehet megbecsülni. E modell alapján:

$$\frac{\Gamma_p}{\Gamma_n} \approx \frac{Z}{N} \exp \left(\frac{B_n - B_p - 0,9 V_p}{T} \right),$$

$$\frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_n} \approx \frac{Z}{2N} \exp \left(\frac{B_n - B_\alpha - 0,9 V_\alpha}{T} \right).$$

Ezekben a formulákban B_n , B_p és B_α a neutron, proton és α -rész kötési energiája a magban, V_p és V_α a Coulomb-gát magassága a magból kilépő protonra és α -részre, T a maghőmérséklet.

A fentiek alapján az $A_2(A_1, xn)A_3$ típusú magreakciók maximális hatáskeresztmetszetére végzett számítások [8, 23] 10 mb-tól 1 nb-ig terjedő értékeket adtak.

III. Proton-radioaktivitás

III. 1. A p -radioaktivitásról általában

A magban levő neutronok számának csökkenésével csökken az utolsó proton kötési energiája, s létrejön a p -bomlás energetikai lehetősége. Elméleti megfontolások alapján a p -bomlás alábbi mechanizmusait tételezik fel (irodalmat lásd a III. 2. fejezetben):

a) Elő lehet állítani olyan protongazdag magokat, melyekben az utolsó proton kötési energiája negatív. Az ilyen magok instabilisak az alapállapotból történő p -emisszióval szemben (a továbbiakban: $p^{(g)}$ -bomlás).

b) Nagyon valószínű, hogy néhány páros Z -jú alapállapotú protongazdag mag csak két proton egyidejű emissziója útján képes elbomlani, s ugyanekkor két, egymás után következő $p^{(g)}$ -bomlás energetikailag nem lehetséges ($2p$ -bomlás).

c) Lehetséges a p -bomlás kétlépcsős mechanizmusa: az első lépcsőben nagy energiájú β^+ -bomlás, a másodikban p -emisszió a leánymag elegendően gerjesztett állapotaiból (késleltetett p -bomlás vagy $\beta^+ - p$ -bomlás).

d) Elképzelhető két proton egyidejű emissziója páros Z -jú mag elegendően gerjesztett állapotairól, melyek egy megelőző β^+ -bomlás eredményeként jönnek létre (késleltetett $2p$ -bomlás vagy $\beta^+ - 2p$ -bomlás).

e) Feltételezhető az is, hogy történhet p -bomlás nagy impulzusmomentumú, ún. konfigurációs izomer állapotból ($p^{(g)}$ -bomlás).

(Itt jegyezzük meg, hogy az előzőek során gyakran használt „ p -bomlás”-on p -emisszióval járó radioaktív átalakulást értettünk általában, a bomlási mechanizmusra való tekintet nélkül. A „ p -bomlás” kifejezést a későbbiekben is fogjuk ilyen értelemben használni.)

Szigorú értelemben véve csak a $p^{(g)}$ - és $2p$ -bomlást tekintik új típusú radioaktív átalakulásnak a jelenleg ismert három alap-típus, az α -bomlás, a β^\pm -bomlás és a spontán hasadás mellett [26]. A proton ill. a proton-pár kirepülését itt a magot körülvevő potenciálgát hátráltatja. Természetesen távolról sem minden „gátalatti” átmenet tekinthető radioaktívnak — ennek igazolására elég, ha a magreakciókban emittált gátalatti protonokra gondolunk. Ha csak a magreakciók útján keletkező p -bomló magokra szorítkozunk, akkor p -radioaktivitáson az atommagoknak csak azon, p -emisszióval járó spontán átalakulásait értjük, melyeknek átlagos időtartama lényegesen meghaladja vagy a megfelelő közbenső magok elbomlásához, vagy a megfelelő direkt folyamatok lejátszódásához szükséges átlagos időtartamot. (Véleményünk szerint tehát *Gol'danskij* [26] hibát követ el, amikor a közbenső magok elbomlásához szükséges idő helyett a közbenső magok élettartamáról beszél, s ráadásul teljesen figyelmen kívül hagyja a direkt folyamatok lehetőségét.) Ez a megfogalmazás lényegében a p -radioaktív atommagok keletkezésének és elbomlásának függetlenségét tartalmazza. Egy példával is illusztráljuk definíciónkat: az $A_2(A_1, xn)A_3$ magreakcióban létrejövő $p^{(g)}$ -bomló A_3 mag csak akkor tekinthető p -radioaktívnak, ha az $A_3 \xrightarrow{p} A_4 + p$ átalakulás átlagos élettartama lényegesen nagyobb, mint az $(A_2 + A_1) \xrightarrow{xn} A_3 + xn$ átalakulása. Ha ui. az átalakulások élettartama azonos nagyságrendű, akkor a két folyamatot nem tekinthetjük függetlennek, azaz p -radioaktivitás helyett az $A_2(A_1, pxn)A_4$ magreakcióval állunk szemben. Számszerűen is kifejezhetjük a függetlenséget: minden, magreakcióban keletkező p -bomló mag akkor tekinthető radioaktívnak, ha p -bomlásának felezési ideje jóval nagyobb, mint $10^{-21} - 10^{-20}$ sec.

A fentiek értelmében világossá válik, hogy miért nem tekintik a $p^{(g)}$ - és $2p$ -radioaktivitást már régen felfedezettnek a B^9 [27] és a Be^6 [28] mag bomlása alapján. Valóban, az alapállapotú B^9 mag instabilis a $B^9 \rightarrow Be^8 + p$ vagy a $B^9 \rightarrow 2He^4 + p$ bomlással szemben. Mindkét bomlás mélyen gátalatti — az elsőnél pl. a bomlási energiának a Coulomb-gát magasságához való viszonya: $x=0,14$. Mégis ennek a bomlásnak annyira rövid a felezési ideje ($3 \cdot 10^{-19}$ sec), hogy a B^9 magot nem tekinthetjük p -radioaktívnak. A Be^6 mag ugyanekkor a $Be^6 \rightarrow He^4 + 2p$, esetleg a kaszkád-szerű $Be^6 \rightarrow Li^5 + p \rightarrow He^4 + p + p$ bomlással szemben instabilis, s itt is mindkét bomlás gátalatti. Az alapállapotú Be^6 mag felezési ideje azonban oly rövid

($2 \cdot 10^{-21}$ sec), hogy nem tekinthetjük $2p$ -radioaktívnak. A továbbiakban az ennyire gyors bomlásokat prompt- p -bomlásnak fogjuk nevezni.

Végül megjegyezzük, hogy p -bomló magok nemcsak erős, hanem gyenge kölcsönhatás révén is keletkezhetnek (késleltetett p -bomlás). Annak magyarázata, hogy az előbb megfogalmazott definícióinkban mégis önkényesen az erős kölcsönhatásokra szorítkoztunk, több okban keresendő. Először: a gyenge kölcsönhatás útján létrejövő p -bomló magok bomlás-mechanismusai sokkal bonyolultabbak, s egyetlen mechanizmuson belül is minőségileg különböző almechanizmusok lehetségesek. Másodszor: az irodalomban jelenleg is vita folyik arról, hogy a d) és e) mechanizmus elvileg egyáltalán lehetséges-e vagy sem. Harmadszor: vita folyik arról is, hogy pl. a késleltetett p -bomlást (melynek létezését ma már kísérleti eredmények is igazolják) radioaktív bomlásnak vagy pedig prompt- p -bomlásnak kell-e tekintenünk. A III. 2. fejezetben részletesen is ismertetjük a p -bomlás lehetséges mechanizmusait, az irodalomban folyó vitát, s végül megpróbáljuk összegezni a vita eredményeit.

III. 2. A p -bomlás lehetséges mechanizmusai

III. 2. a. $p^{(g)}$ -bomlás

Elegendően neutronszegény magoknál az utolsó proton kötési energiája negatívvá válik; létrejön az alapállapotból történő p -bomlás energetikai lehetősége. Erre először B. Dzselepev [6] mutatott rá. A $p^{(g)}$ -bomlás képe analóg az atommagok alapállapotából történő α -bomlásával [18]. A különbségek a következők:

1. Adott rendszámú mag Coulomb-gátjának magassága protonokra nézve fele akkora, mint α -részecskékre. Ez azzal a következménnyel jár, hogy azonos bomlási energia ($B_p = B_\alpha < 0$) mellett a $p^{(g)}$ -bomlás felezési ideje nagyságrendekkel kisebb, mint az α -bomlásé. Egy további következmény, hogy a $p^{(g)}$ -bomló magok alapállapotának Γ_p szélessége igen nagy (> 1 MeV) lehet.

2. A $p^{(g)}$ -bomlásnál az emittált részecske l pályaimpulzusmomentuma sokkal nagyobb szerepet játszik, mint az α -bomlásnál, mivel egyenlő feltételek mellett a centrifugál-gát magassága protonokra nézve négyszer nagyobb, mint α -részecskékre. A centrifugál-gátnak a Coulomb-gáthoz viszonyított relatív magassága pedig protonokra közel egy nagyságrenddel nagyobb, mint α -részecskékre. Ezért a $p^{(g)}$ -bomlás felezési ideje $l > 0$ pályamomentumú protonok emissziója esetén sokkal jelentősebben meghosszabbodnak, mint az α -bomlás felezési ideje analóg feltételeknél. Az α -bomlásnál általában az α -rész nem visz el pályamomentumot. A $p^{(g)}$ -bomlásnál viszont még egy-proton állapotok esetén is fontos a pályamomentum, mivel az $s_{1/2}$ -, $p_{3/2}$ -, vagy $1_{1/2}$ -, $d_{5/2}$ vagy $3_{1/2}$ - vagy $f_{7/2}$ vagy $g_{7/2}$ -állapotú protonok különböző, $l = 0, 1, 2$ vagy 3 értékhez tartozó centrifugál-gáton kell hogy keresztülhaladjanak.

3. Az α -bomlásnál azonos jellegű magok közötti átmenet megy végbe; egy páros mag páros magba, egy páratlan páratlanba megy át a bomlás során. Ezzel szemben a $p^{(g)}$ -bomlásnál más a helyzet; a bomlás eredményeként jelentős strukturális változás lép fel.

A $p^{(g)}$ -bomló mag p -emisszióval szembeni átlagos élettartamát úgy becsülhetjük meg, hogy a $p^{(g)}$ -bomlást egy protonnak a mag Coulomb + centrifugál-gátján, alagút-effektussal történő áthatolásának tekintjük. Ezt a problémát az α -bomlás elméletének kidolgozásával gyakorlatilag megoldották, így a következő megmondások és formulák már Bethe [29] könyvében is megtalálhatók.

Egy-proton állapotokat feltételezve a $p^{(g)}$ -bomlás λ_p bomlási állandójára félklasszikus megfontolásokból a következő kifejezés adódik:

$$\lambda_p = \frac{1}{\tau_p} = \frac{V}{2R} P_l(E). \quad (7)$$

Itt v a proton sebessége a magon belül, R a $p^{(g)}$ -radioaktív mag sugara és $P_l(E)$ az E bomlási energiájú, l pályamomentumú proton áthatolóképessége a Coulomb + centrifugál-gáton. $P_l(E)$ -re, WKB-közelítésben, az alábbi formulát kapjuk:

$$P_l(E) = P(x, y) = \exp \left\{ -2g \left[\frac{\pi}{4\sqrt{x}} + \frac{1}{2\sqrt{x}} \arcsin \frac{1-2x}{\sqrt{1+4xy}} - \sqrt{y+1-x} + \sqrt{y} \ln \frac{1+2y+\sqrt{4y(y+1-x)}}{\sqrt{1+4xy}} \right] \right\}, \quad (8)$$

ahol $x = E/V_p$ és $y = V_{pl}/V_p = l(l+1)/g^2$. Az x -ben és y -ban szereplő újabb ismeretlen mennyiségek közül

$$V_p = Ze^2/R,$$

a Coulomb-gát magassága a magból kilépő protonnal szemben,

$$V_{pl} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mR^2}$$

a centrifugál-gát magassága az l pályamomentumú protonnal szemben,

$$g = \hbar^{-1} \sqrt{2mZe^2 R},$$

az ún. karakterisztikus pályamomentum, melyet a $V_p = V_{pl}$ feltételezésből lehet megkapni, és végül Z és R , a maradék mag rendszáma és sugara, e az elemi töltés, m a proton redukált tömege, \hbar a 2π -vel osztott Planck állandó. x és y tehát a bomlási energiának ill. a centrifugál-gát magasságának a Coulomb-gát egységében kifejezett értéke.

A számításoknál általában használt $l=0$ feltételezés mellett:

$$P_0(E) = P(x) = \exp \left\{ -2g \left[\frac{1}{\sqrt{x}} \arccos \sqrt{x} - \sqrt{1-x} \right] \right\}. \quad (8')$$

Ismeretes, hogy a hasonló összefüggések alapján kiszámított λ_α értékek három, vagy még több nagyságrenddel is különbözhetnek a kísérletileg meghatározott α -bomlási állandóktól. Az α -bomlásnál ugyanis szerepet játszik még egy további valószínűségi tényező, mely leírja, hogy a magban vagy annak felületén milyen valószínűséggel alakulnak ki α -részecskék. A p -bomlásnál ez a probléma nem áll fenn, így a (7)–(8') formulák minden bizonnyal jobb közelítést adnak, mint az α -bomlásnál. Ezt Jänecke [13], néhány ismert adat felhasználásával, be is bizonyította.

A következőkben a legfontosabb munkák alapján összegezzük a $p^{(g)}$ -bomlás várható tulajdonságait, s rámutatunk kísérleti tanulmányozásuk lehetőségeire ill. nehézségeire.

A könnyű és közepes magok ($Z \leq 40$) tartományában az első részletes számításokat *Gol'danszkij*, *Baz'* és *Zel'dovics* [12, 11] végezték. Becsléseiket a töltésinvariancia elvéből levezetett (1)–(6') formulák segítségével nyerték. Megállapították, hogy a p -stabilitási határ növekvő Z -vel egyre messzebb távolodik a stabil magoktól; a páratlan Z -jú magok $p^{(g)}$ -instabilitása kevésbé neutronszegény izotópoknál következik be, mint a páros Z -jú magoké. A kísérlet szempontjából igen jelentős az a megállapítás, hogy ha $\tau_p > 1-10$ sec, akkor a $p^{(g)}$ -bomlást teljesen „leárnyékolja” a β^+ -bomlás, ha viszont $\tau_p < 10^{-12}$ sec, akkor nem lehet észlelni a p -emisszió késését még vastag fotoemulzió vagy Wilson-kamra segítségével sem. (A $Z \leq 40$ tartományba eső $p^{(g)}$ -bomló izotópokban az utolsó neutron kötési energiája igen nagy, ezért ezek valamennyien stabilisak az alapállapotból történő α -bomlással szemben.) Kiszámították a mérhetőnek tekintett $T_{1/2} = 10^{-12} - 10$ sec intervallumnak megfelelő p -energia-intervallumot a rendszám függvényében és az $l=0$ feltételezéssel: 0,04 MeV-ig $Z=10$, 0,1–0,35 MeV $Z=20$, 0,2–0,7 MeV $Z=30$ és 0,35–1,1 MeV $Z=40$ esetén. Ilyen energiájú protonok spektroszkópiái detektálása még akkor is rendkívül nehéz feladat lenne, ha a $p^{(g)}$ -bomló magok kísérleti vizsgálatánál elkerülhetetlenül fellépő intenzív β^\pm -, γ - és α -hátter nem létezne.

A legkönnyebb magok bomlás-tulajdonságainak vizsgálata során *Jänecke* [13] figyelemre méltó becsléseket végzett arra vonatkozóan, hogy mennyiben befolyásolja a proton $l > 0$ pályamomentuma a $p^{(g)}$ -bomlás felezési idejét. A $\text{Sc}^{39} \rightarrow \text{Ca}^{38} + p$ bomlás felezési idejének energia- és pályamomentum-függését a (7,8) egyenletek alapján számította ki. Figyelembe vette a becsült $E = (0,7 \pm 0,5)$ MeV bomlás-energia hibáját és feltételezte, hogy a bomlás során $l=1, 2, 3$ és 4 pályamomentumú protonok emittálódhatnak vagyilagosan. (A Sc^{39} feltételezhető héjmodell-konfigurációja alapján legvalószínűbb egy $1f_{7/2}$ állapotú, $l=3$ pályamomentumú proton emissziója.) Számításai szerint az $E=0,7$ MeV bomlás-energiához és az $l=0$ pályamomentumhoz tartozó felezési idő rendre 4-, 40-, 1200- és 59000-szeresére növekszik, ha figyelembe vesszük az $l=1, 2, 3$ és 4 esetén fellépő centrifugálgátat. Az energia-becslés pontatlansága ennél is nagyobb eltolódásokat eredményezhet a

1. TÁBLÁZAT

$\text{Sc}^{39} \rightarrow \text{Ca}^{38} + p$		
E (MeV)	$l(\hbar)$	$T_{1/2}$ (sec)
0,2	3	$4,2 \cdot 10^{-5}$
0,7	3	$3,9 \cdot 10^{-14}$
1,2	3	$1,0 \cdot 10^{-16}$

felezési időben, aminek illusztrálására az 1. táblázatban közöljük *Jänecke* [13] számításait. A kísérlet szempontjából tehát nagy jelentőségűek lehetnek a bomlás-energia becslésénél elkövetett pontatlanságok, valamint az $l > 0$ pályamomentumú $p^{(g)}$ -bomlások. Mindezek ellenére a könnyű magoknál változatlanul problémát jelent az igen alacsony p -energiák spektroszkópiái detektálása.

A nehéz magok ($Z > 50$) $p^{(g)}$ -bomlásának valószínűségét eddig csak *Karnauhov* és *Tyer-Akopján* [18] tanulmányozták. Az alábbiakban az általuk elért, a kísérlet számára rendkívül fontos eredményeket ismertetjük.

A $Z > 50$ tartományban a $p^{(g)}$ -bomlás valószínűségét a β^+ -bomlás konkurenciáján túl az α -bomlás konkurenciája is fenyegeti. Meglepő, hogy ennek ellenére a stibiumtól a talliumig valamennyi páratlan Z -jú elem neutronszegény izotópjai között nem is egy olyan akad, melynek legvalószínűbb bomlásmódja a $p^{(g)}$ -bomlás, s ugyanekkor τ_p a $10^{-10} - 10^{-1}$ sec mérhető tartományba esik. Ilyen izotópok: $\text{Sb}^{105, 106}$, $\text{J}^{109, 110}$, $\text{Cs}^{114, 115}$, $\text{La}^{119, 120}$, $\text{Pr}^{124, 125}$, $\text{Pm}^{128, 129}$, $\text{Eu}^{132, 133}$, $\text{Tb}^{136-138}$, $\text{Ho}^{141, 142}$, $\text{Tm}^{146-148}$, $\text{Lu}^{151-154}$, $\text{Ta}^{157-160}$, $\text{Re}^{162-165}$, $\text{Ir}^{165-168}$, $\text{Au}^{170-173}$ és $\text{Tl}^{172-175}$.

A szerzők a mérhető időtartomány felső határát a β^+ -bomlás konkurrenciájának figyelembe vételével kapták. A $Z > 50$ tartományban ugyanis az energetikailag $p^{(g)}$ -bomló magoknál a β^+ -bomlás energiája 10–15 MeV, így megengedett átmenetek esetén a felezési idők 10^{-2} – 10^{-1} sec nagyságrendűek lesznek. A $p^{(g)}$ -bomlás ténylegesen tehát csak akkor fog bekövetkezni, ha $\tau_p \leq 10^{-1}$ sec.

Azt a tényt, hogy minden, az ónnál nehezebb elemnél 2–4 olyan izotópot lehet találni, amely a $p^{(g)}$ -bomlás kísérleti tanulmányozására alkalmas, azzal lehet magyarázni, hogy Z növekedésével B_p egyre gyengébben függ a neutronok számától.

$Z > 50$ esetén valamennyi, a $p^{(g)}$ -bomlás tartományába eső mag instabilis α -részek emissziójával szemben. Az alapállapotból történő α -bomlás is csak akkor képes konkurrálni a β^+ -bomlással, ha $\tau_\alpha \leq 10^{-1}$ sec. *Karnauhov és Tyer-Akopján* [18] számításai azonban azt mutatják, hogy a $p^{(g)}$ -bomlás és az α -bomlás tartományai csak két helyen fedik át egymást: olyan neutron- és proton-számoknál, amelyek valamivel nagyobbak, mint az 50 és 82 mágikus számok. A $p^{(g)}$ -tartomány minden más helyen „megelőzi” az α -tartományt. Mivel azonban τ_p a magban levő neutronok számának csökkenésével sokkal gyorsabban csökken, mint τ_α , ezért páratlan Z -jű izotópok esetén még az átfedési helyeken is valószínűbb lesz a $p^{(g)}$ -bomlás, mint az α -bomlás. A páros Z -jű magok $p^{(g)}$ -instabilitása $Z > 50$ esetén is lényegesen nagyobb neutronhiány mellett következik be, mint a páratlan Z -jű magoké. Emiatt a páros Z -jű izotópok $p^{(g)}$ -bomlását — különösen az átfedési helyeken — erősen leárnyékolja az α -bomlás.

Az ólomnál nehezebb elemek esetén az α -bomlás valószínűsége erősen megnő. Ez a 82-es mágikus proton-számmal kapcsolatos. *Karnauhov és Tyer-Akopján* [18] számításai szerint azonban, τ_p erős tömegszámfüggése miatt, a $p^{(g)}$ -bomlás számos esetben itt is nagyobb valószínűségű lehet, mint az α -bomlás, egészen a berkéliumig. Részben a 126-os mágikus neutronsám, részben a spontán hasadás és az α -bomlás konkurrenciája miatt a $p^{(g)}$ -bomlás csak a berkéliumnál nehezebb ($Z > 97$) magok esetén nem fog szerepet játszani.

A $Z > 50$ és $10^{-10} \leq \tau_p \leq 10^{-1}$ sec tartományba eső, páratlan Z -jű $p^{(g)}$ -bomló izotópok E bomlási energiái már elég nagyok (0,6–2,3 MeV) ahhoz, hogy spektroszkópiai vizsgálatuk reményteljes lehessen.

A $p^{(g)}$ -bomlás kísérleti vizsgálata tehát nem kis nehézségekbe ütközik. A könnyű $p^{(g)}$ -radioaktív magok relatíve könnyen előállíthatók, a bomlás energiája és felezési ideje viszont nagyon kicsi. A nehezebb $p^{(g)}$ -radioaktív magoknál fellépő nagyobb energiák és felezési idők biztatóak ugyan, ilyen magok előállítása ezzel szemben csak igen kis hatáskeresztmetszetű magreakciók útján lehetséges. Ezek az okok magyarázzák azt, hogy $p^{(g)}$ -radioaktivitást kísérletileg még nem sikerült észlelni.

A nehézségek ellenére a $p^{(g)}$ -bomlás kísérleti vizsgálata rendkívül kíváncsú lenne, mivel ebből az erősen neutronszegény magok héjszerkezetére és a Coulombgátnak a mag szélénél kialakuló formájára vonatkozóan szerezhetnénk ismereteket, hogy csak a legfontosabbakat említsük.

III. 2. b. $2p$ -bomlás

A p -stabilitási határhoz közel eső, páros Z -jű magok párenergiaja miatt az energetikai feltételek lehetnek olyanok, hogy két proton $A \xrightarrow{p} B \xrightarrow{p} C$ szerinti, egymást követő emissziója nem lehetséges ($A \xrightarrow{p} B$ sem lehetséges), ugyanakkor két proton szimultán, $A \xrightarrow{2p} C$ szerinti emissziója viszont lehetséges. Erre először *Zel'dovics* [10]

mutatott rá. A $2p$ -bomlás tulajdonságainak részletes elméleti analízisét Gol'danszkij [11, 12, 23] végezte el.

Legyen az A mag rendszáma $Z = 2m + 2$, a B magé pedig $Z = 2m + 1$ (a C mag rendszáma ekkor $Z = 2m$). Jelölje $B_{p,ps}$ és B_{2p} illetve $\Gamma_{p,ps}$ és Γ_{2p} az A mag utolsó és utolsó két protonjának kötési energiáját illetve p - és $2p$ -emisszióval szembeni nívószélességét. A B mag esetén $B_{p,pn}$ és $\Gamma_{p,pn}$ jelölje a megfelelő mennyiségeket. Legyen a B mag utolsó, $(2m + 1)$ -ik protonjának kötési energiája negatív ($B_{p,pn} < 0$). Az egy proton hozzáadásával létrejövő A mag utolsó, $(2m + 2)$ -ik protonjának kötési energiája első közelítésben az $E_{pár}$ párenergiával lesz nagyobb, mint $B_{p,pn}$:

$$B_{p,ps} = E_{pár} + B_{p,pn} = E_{pár} - |B_{p,pn}|.$$

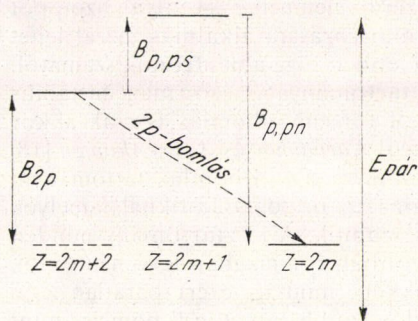
Ha $B_{p,ps}$ pozitív, akkor a $(2m + 2)$ -ik proton emissziója energetikailag tiltott, lehetséges viszont egy proton-pár emissziója,

$$|B_{2p}| = |B_{p,pn}| - B_{p,ps}$$

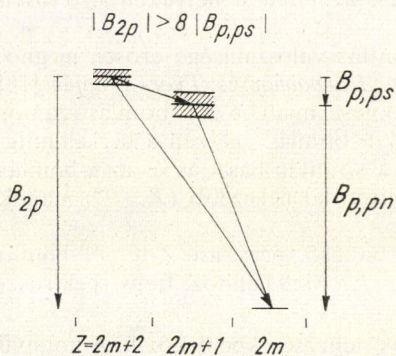
energia felszabadulása mellett ($B_{2p} < 0$). A fenti energiaviszonyokat az 1. ábra szemlélteti.

Az előzőekből következik, hogy a $2p$ -bomló magoknál mindig $B_{p,ps} > 0$, $B_{p,pn} < 0$, de $|B_{p,pn}| > B_{p,ps}$, s emiatt $E_{pár} \cong B_{2p}$, azaz a $2p$ -bomlás energiája nem lehet nagyobb a párenergiánál.

Két proton egymást követő és egyidejű emisszióját, mint arra Gol'danszkij [11, 12, 23] rámutatott, csak az energiaviszonyok alaposabb tanulmányozásával

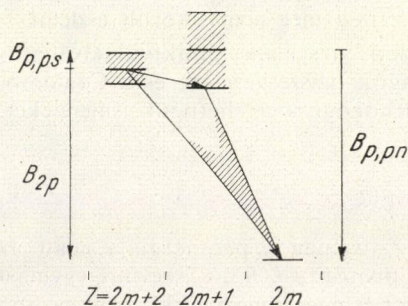


1. ábra. Energiaviszonyok a $2p$ -bomlásnál



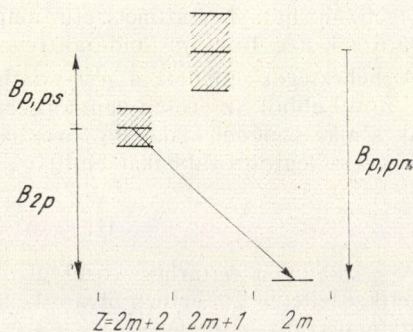
2a. ábra.

$$|B_{p,pn}| > |B_{2p}| > |B_{p,pn}| - \frac{1}{2} \Gamma_{p,pn}$$



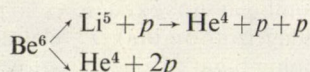
2b. ábra.

$$|B_{2p}| + \frac{1}{2} \Gamma_{2p} < |B_{p,pn}| - \frac{1}{2} \Gamma_{p,pn}$$



2c. ábra.

lehet megkülönböztetni. Ehhez mindenekelőtt fel kell tételeznünk, hogy $B_{p,pn} < 0$, azaz a B mag instabilis a $p^{(g)}$ -bomlással szemben. Amíg $B_{p,ps}$ szintén negatív és csak valamivel kisebb, mint $B_{p,pn}$, addig két egymást követő $p^{(g)}$ -bomlás következik be. Amikor $B_{p,ps}$ annyira kis negatív mennyiséggé válik, hogy teljesül a $|B_{2p}| > > 8 |B_{p,ps}|$ egyenlőtlenség, akkor a $2p$ -bomlás kezd észrevehetően konkurrálni az egymást követő $p^{(g)}$ -bomlással (2/a ábra). Ha $B_{p,ps} > 0$, azonban kisebb, mint $\frac{1}{2} \Gamma_{p,pn}$, akkor a két proton emissziójának egyidejű és egymást követő folyamata már megkülönböztethetatlenné válik (2/b ábra). Példaként a már említett Be^6 [28] mag bomlását említhetnénk meg:



Végül, abban az esetben, amikor $B_{p,ps}$ annyira nagy pozitív mennyiség, hogy az A és B mag nívói nem fedik át egymást, eljutunk a „tisztá” $2p$ -bomlás esetéhez (2/c ábra). A 2/c ábrán látható egyenlőtlenség a „tisztá” $2p$ -bomlás energetikai feltétele.

A $2p$ -bomlás tulajdonságait vizsgálva *Gol'danszkij* [11, 12, 23] rámutatott, hogy két proton egyidejű emissziójának valószínűségét kétféleképpen is kiszámíthatjuk. Vagy meghatározzuk egy E_0 ($E_0 = B_{2p}$) energiájú, $L=0$ pályamomentumú diproton (korrelált proton-pár) áthatolóképeségét a megfelelő Coulomb-gáton, vagy pedig kiszámoljuk két különálló, E és $E_0 - E$ energiájú és $l=0$ pályamomentumú proton (nem korrelált protonok) áthatolóképeségének szorzatát. Az utóbbi szorzatnak $E = \frac{1}{2} E_0$ -nál maximuma van, azaz a legvalószínűbb két azonos energiájú proton emissziója. Ekkor mindkét módszer ugyanarra az áthatolóképeség-értékre, azaz azonos felezési időre vezet. Eszerint közömbös, hogy a diproton felbomlása komponenseire a Coulomb-gát belső határán vagy annak külső felületén történik-e meg.

Jänecke [13] hívta fel rá a figyelmet, hogy ez a konklúzió azonban csak $l=0$ esetén áll fenn, azaz olyan diprotonoknál, melyeknek héjmodell-konfigurációja $[(\pi s_{1/2})^2]_{0+}$. Egyébként, pl. a Ne^{16} mag esetén, amikor egy $[(\pi d_{5/2})^2]_{0+}$ konfigurációjú diproton emittálódik, a centrifugál-gát hatása miatt nem korrelált protonok emissziójának valószínűsége erősen lecsökken a diprotonemisszió valószínűségéhez képest. Másrészt egy diproton emissziójánál bomlás-energiaként nem az E_0 teljes energiát, hanem csak az $E_0 - \varepsilon_0$ energiát kell tekintenünk, mivel ε_0 energia szükséges a diprotonnak a Coulomb-gát külső felületén való szétszakításához. Itt ε_0 a szingulet ($p-p$)-köölcsönhatás virtuális nívójának energiája. *Jänecke* [13] ezért feltételezte, hogy a $2p$ -bomlás során általában egy $L=0$ pályamomentumú, $E_0 - \varepsilon_0$ energiájú diproton hatol át a Coulomb-gáton, és a két proton a gát külső felületén válik szét. Csak $E_0 \geq 2\varepsilon_0$ esetén, továbbá ha a diproton konfigurációja a bomló magon belül $[(\pi s_{1/2})^2]_{0+}$, kerülhet előtérbe a nem korrelált protonok emissziója.

Általában azonban a diproton nem a potenciál-gát belső határán s nem is annak külső felületén, hanem valahol a gát belsejében hullik szét komponenseire. Így a $2p$ -bomlásban emittált részecske a potenciál-gát belső határától (az R_r mag-sugártól) egy bizonyos R_0 effektív távolságig mint diproton, R_0 -tól $R_{\max}(E_0)$ -ig (a potenciál-gát külső felületéig) pedig mint két különálló, de korrelált proton viselkedik; R_r -tól R_0 -ig csak a Coulomb-gát, R_0 -tól $R_{\max}(E_0)$ -ig azonban már a Coulomb + centrifugál-gát hat. Ezen feltételezéssel legújabbán *Gol'danszkij* [30] számolta ki az áthatolóképeséget, s arra az eredményre jutott, hogy a legvalószínűbb bomlásmód a „szétszakadási távolság” $R_0 = \hbar \sqrt{l(l+1)/m_p \varepsilon_0}$ értékénél következik be.

Ha $R_0 < R_{\max}(E_0)$, akkor a diproton szétszakadása a gát alatt történik meg —, olyan távolságban, mely jóval meghaladja nemcsak a mag R , sugarát, de a „szabad diproton” effektív sugarát ($R_{2p} = \hbar/\sqrt{m_p \varepsilon_0} \approx 2,3 \cdot 10^{-12}$ cm) is. $R_0 > R_{\max}(E_0)$ esetén a $2p$ -bomlásban emittált részecske egész gátalatti útját diprotonként teszi meg. $[(\pi s_{1/2})^2]_{0+}$ konfigurációjú diproton emissziójánál $l=0$, ezért $R_0=0$, azaz ilyenkor a diproton a Coulomb-gát belső határán széthullhat.

$2p$ -bomló magokat *Gol'danskij* [11, 12, 23], *Jänecke* [13] valamint *Karnauhov* és *Tyer-Akopján* [18] jósoltak meg. A $2p$ -bomlás a stronciumnál ($Z=38$) nehezebb elemek esetén már nem képes konkurálni a megengedett β^+ -átmenettel [18]. Ez onnan adódik, hogy a Coulomb-gát növekedése és a párenergia korlátozott volta miatt ezen elemek protongazdag izotópjainak τ_{2p} élettideje nagyobb, mint 10^{-1} sec. Tekintettel arra, hogy a Coulomb-gát a $2p$ -emisszióval szemben kétszer akkora, mint a p -emisszióval szemben, a $2p$ -bomlási felezési idők sokkal inkább a mérhető tartományba esnek, mint a p -bomlásiak. Sőt, a $2p$ -bomlást még akkor is meg lehet figyelni (pl. vastag fotoemulzió vagy Wilson-kamra segítségével), ha majdnem prompt megy végbe ($\tau_{2p} \approx 10^{-19}$ sec), mivel a két emittált proton energiája között erős korreláció kell hogy fennálljon [11, 12, 23]. Komoly kísérleti nehézséget jelent viszont az a tény, hogy a $2p$ -bomlás energiája mindig kisebb, mint a párenergia. Emiatt általában 1 MeV-nél kisebb energiájú protonok koincideneciában történő spektroszkópiái detektálása a feladat, s számolni kell az elkerülhetetlenül fellépő $p^{(g)}$ - és késleltetett p -bomlás proton-háttérével is.

A $2p$ -bomlásban emittált két proton energia- és szögeloszlása a két részecske magon belüli és kívüli párkölcsönhatását tükrözi. Az energia- és szögeloszlásra vonatkozóan *Gol'danskij* [11, 12, 23], *Galitsky* és *Chehtsov* [31] valamint *Jänecke* [13] végeztek számításokat.

Jänecke az általa feltételezett bomlás-mechanizmus szerint emittált korrelált protonok energia- és szögeloszlását a protonok közötti Coulomb-taszítás és a maradék mag visszalökési energiája elhanyagolásával számította ki. Számításai szerint az energiaeloszlás az $E = \frac{1}{2}E_0 \pm \sqrt{\varepsilon_0(E_0 - \varepsilon_0)}$ határokon kívül zéró, a legvalószínűbb energia $E = \frac{1}{2}E_0$, az eloszlás szélessége pedig a potenciál-gát paramétereinek függvénye. Ha ϑ_0 -lal ($\lg \frac{1}{2}\vartheta_0 = \sqrt{\varepsilon_0/(E_0 - \varepsilon_0)}$) jelöljük a maximális nyílásszöget, melyet a két, korrelált proton iránya egymással bezárhat, akkor a ϑ nyílásszögek 0° -tól ϑ_0 -ig terjedő eloszlása ϑ_0 -nál maximumot mutat. Lényegében hasonló eredményekre vezettek az előbb említett szerzők által a $2p$ -bomlásban emittált protonok energia- és szögeloszlására végzett, részletesebb és pontosabb elméleti számítások is.

A $2p$ -bomlás kísérleti vizsgálatánál fellépő nehézségek — melyekről már szöveltünk — és az eddigi sikertelen kísérletek $2p$ -radioaktív mag előállítására és észlelésére semmiképpen sem csökkenthetik az ez irányban teendő további erőfeszítéseket. Magának a $2p$ -bomlás jelenségének, de különösen az emittált protonok energia- és szögeloszlásának kísérleti tanulmányozása ugyanis olyan információkat szolgáltat, melyek a magerők természete és ezzel az egész magfizika szempontjából alapvető jellegűek.

III. 2. c. Késleltetett p -bomlás

Egy megelőző β^+ -bomlást követő, úgynevezett késleltetett p -bomlás lehetőségére először *Alvarez* [1, 3] hívta fel a figyelmet. *Gol'danskij* [32] mutatott rá, hogy ez a bomlásmód elsősorban a páros rendszámú protongazdag izotópok sajátossága.

Ha a proton energiája kisebb, mint a Coulomb-gát magassága, akkor a proton a magból alagút-effektus révén jut ki („gátalatti” $\beta^+ - p$ -bomlás). A bomlásképp ekkor hasonló a hosszú hatótávolságú α -részek nehéz magok által történő emissziójának képehez. Ha a proton energiája nagyobb, mint a Coulomb-gát magassága („gátfeletti” $\beta^+ - p$ -bomlás), akkor nyilvánvaló az analógia a késleltett neutronok emissziójával [18].

Említettük már, hogy amilyen mértékben a stabil izotópok tartományától balra elmozdulunk, olyan mértékben csökken ill. nő az egyes neutronszegény izotópok utolsó protonjának B_p kötési- ill. E_{β^+} maximális bomlási energiája. Késleltetett protonok emissziója csak abban az esetben lehetséges, ha az E_{β^+} mennyiség meghaladja a leánymagbeli utolsó proton kötési energiáját, s, ezen túlmenően, a leánymag E^* gerjesztési energiája olyan, hogy a radiációs átmenet részéről fenyegető konkurrencia elhanyagolható: $\Gamma_\gamma \ll \Gamma_p$. (Néhány szerző [13, 18] a késleltetett α -bomlás konkurrenciáját is analizálta; ez azonban sokkal kevésbé jelentős, mint a radiációs átmeneté.) Ez utóbbi feltétel lényegében véve determinálja a késleltetett p -bomlásban emittált protonok energiáját: $E_p = E^* - B_p$. A γ -sugárzás konkurrenciája $E_p > E_{p0}$ esetén válik elhanyagolhatóvá, ahol E_{p0} az a kinetikus energia, amely-nél a proton τ_p átlagos tartózkodási ideje a magban kb. 10^{-14} sec. E_{p0} a (7) egyenlet alapján számítható ki.

Ily módon egy megelőző β^+ -bomlást követő p -emisszió létrejöttéhez feltétlenül szükséges a

$$A_p = E_{\beta^+} - (E_{p0} + B_p) > 0 \quad (9)$$

egyenlőtlenség teljesülése [18]. A *Gol'danskij* [32] által levezetett hasonló rendeltetésű egyenlőtlenség nem bizonyult helyesnek. *Gol'danskij* ugyanis elengedhetetlenül szükségesnek vélte, hogy a p -instabil nivók kedvezően megengedett β^+ -átmenetek révén jöjjenek létre. Késleltetett p -bomlást azonban akkor is megfigyelhetünk, ha a p -emisszió egy közönséges β^+ -átmenet után következik be, sőt még akkor is, ha ezzel az átmenettel egy „ p -emisszió nélküli” kedvezően megengedett átmenet konkurrál [33]. Minden a kérdéses izotóp keletkezési hatáskeresztmetszetétől és a mérőberendezés érzékenységtől függ.

Mindazok a magok, melyekre a (9) egyenlőtlenség igaz, energetikailag képesek késleltetett protonokat emittálni, a bomlás valószínűsége azonban a legkülönbözőbb lehet. A neutronhiány növekedésével nő a A_p különbség, s ezzel együtt nő a késleltetett p -bomlás valószínűsége is. A késleltetett p -emisszió valószínűségét, $P(B_p)$ -t *Vlaszov* [24] becsülte meg a késleltetett neutronok emissziós-valószínűségére *Kipin* [34] által levezetett formula alapján.

Annak valószínűsége, hogy a β^+ -átmenet a leánymag E és $E + dE$ közé eső energiájú gerjesztett állapotára történik

$$W(E)dE = \text{const} (E_{\beta^+} - E)^5 \varrho(E)dE,$$

ahol $\varrho(E)$ a leánymag nivósűrűsége E gerjesztési energiánál. Azon β^+ -bomlások aránya, amelyek a leánymag utolsó protonjának B_p kötési energiájánál nagyobb energiájú gerjesztett állapotokra vezetnek, adja meg a késleltetett p -emisszió való-

színúségét. Ezt a következő formában lehet felírni:

$$P(B_p) = \frac{\int_{B_p}^{E_{\beta^+}} \frac{\Gamma_p}{\Gamma_\gamma + \Gamma_p} (E_{\beta^+} - E)^5 \varrho(E) dE}{\int_0^{E_{\beta^+}} (E_{\beta^+} - E)^5 \varrho(E) dE}, \quad (10)$$

ahol a megfelelő jelöléseket ismerjük. Nyilvánvaló, hogy a számlálóban levő integrál járuléka B_p -től $(E_{\beta^+} + B_p)$ -ig zérusnak vehető, hiszen itt $\Gamma_\gamma \gg \Gamma_p$. Az integrál alsó határát tehát $(E_{\beta^+} + B_p)$ -nek kell választanunk: ekkor az egész integrálandó tartományra igaznak vehetjük a $\Gamma_\gamma \ll \Gamma_p$ reláció, azaz a $\frac{\Gamma_p}{\Gamma_\gamma + \Gamma_p} = 1$ egyenlőség teljesülését. Ezért végül:

$$P(B_p) = \frac{\int_{(E_{\beta^+} + B_p)}^{E_{\beta^+}} (E_{\beta^+} - E)^5 \varrho(E) dE}{\int_0^{E_{\beta^+}} (E_{\beta^+} - E)^5 \varrho(E) dE}. \quad (10')$$

A tényleges bomlásvalószínűség természetesen lényegesen eltérhet a (10') alapján kiszámítottól, aminek oka elsősorban a $\varrho(E)$ nívósűrűség helyes megválasztásának nehézségében rejlik.

Késleltetett p -bomló magokat *Karnauhov* és munkatársai [7, 8, 18], *Gol'danszkij* [32], *Vlaszov* [24] és *Jänecke* [13] jósoltak meg. A késleltetett p -bomlás gyakorlatilag az egész periódusos rendszeren elterjedt kell hogy legyen — mutatják a legújabb számítások [18]. Nem bizonyultak tehát helytállóaknak azok a jóslatok [24, 32], melyek szerint a nehéz magok tartományában ezen bomlásmód létezése kizárt.

A p -bomlás mechanizmusai közül a késleltetett p -bomlás az, amely a leg hozzáférhetőbb a kísérleti vizsgálat számára. A proton-energiák több MeV-esek is lehetnek, a felezési időket pedig még „gátalatti”-bomlásnál is gyakorlatilag a megelőző β^+ -bomlások jól mérhető felezési idői határozzák meg. Ezzel magyarázható, hogy ma már több mint tíz, késleltetett p -bomló magot ismerünk (l. a III. 4. fejezetet!).

A késleltetett p -bomlás kísérleti vizsgálata elsősorban magspektroszkópiai szempontból nagy fontosságú. Nem lebecsülendő azonban az a metodikai jelentőségű tény sem, hogy az új, protongazdag magok felhasználhatók azon magreakciók tanulmányozására is, amelyek képződésükre vezetnek. Az ilyen, aktivációs reakció-mechanizmus-vizsgálatoknak különösen a nehéz ionokkal létrehozott nukleon-átadási reakcióknál lehet komoly szerepe — hasonlóan a N^{17} mag késleltetett neutron-sugárzásán alapuló aktivációs módszerhez [35].

Ezen fejezet befejezéseként röviden kitérünk még annak a vitának az ismertetésére, melynek alapkérdése: radioaktív bomlásnak tekinthető-e a késleltetett p -bomlás vagy nem? *Gol'danszkij* [26] arra az álláspontra helyezkedik, hogy a késleltetett p -bomlás a késleltetett neutron-emisszióval és a könnyű magok késleltetett (hosszú hatótávolságú) α -emissziójával analóg. Innen eredően nem ismer el minőségi különbséget a „gátalatti” - és „gátfeletti”-bomlás között; szerinte a leánymag

p -bomlása mindig prompt. Vele szemben a dubnai csoport az ezen fejezet elején ismertetett analógiát tartja helyesnek [18], s minőségi különbséget lát a „gátalatti”- és „gátfeletti”-bomlás között. E csoport véleményét fejti ki Petrov [36], s végső konklúziója a következő: a „gátfeletti”-bomlás valóban mindig prompt, a „gátalatti”-bomlás azonban — különösen a nehéz leánymagoknál és megfelelően alacsony bomlási energiáknál — lehet radioaktív. Érvelésének igazolására olyan, Dubnában identifikált nehéz, késleltetett p -sugárzókat [25] említ, melyeknek protonjai között vannak olyan energiájúak is, amelyeket a leánymag Coulomb-gátja 10^{-12} sec ideig képes a magon belül visszatartani. A dubnai csoport álláspontját támogatja Jänecke [13] is.

Az elmondottak alapján helyesnek kell tekintenünk a dubnaiak érvelését és konklúzióját, bár azt hozzá kell tennünk, hogy 10^{-12} sec-nál hosszabb visszatartások a radiációs átmenet konkurrenciája miatt aligha képzelhetők el, s emiatt még a számításba vehető legrövidebb β^+ -bomlási felezési idők ($10^{-2} - 10^{-1}$ sec) esetén is ezek a visszatartások gyakorlatilag elhanyagolhatóak.

A jelen, továbbá a III. 1. fejezetben elmondottak szerint mi minden olyan „gátalatti” késleltetett p -bomlást radioaktívnak tekintünk, melynek során a leánymag potenciál-gátja $10^{-21} - 10^{-20}$ sec-nál lényegesen hosszabb ideig képes a protonokat a magon belül visszatartani. Prompt bomlásnak tekintünk viszont minden „gátfeletti”-bomlást, továbbá azokat a „gátalatti”-akat is, melyeknél a visszatartás ideje $10^{-21} - 10^{-20}$ sec nagyságrendű.

III. 2. d. Késleltetett $2p$ -bomlás

Gol'danskij [32] mutatott rá először arra, hogy nem ritka az az eset, amikor egy protongazdag páratlan Z -jú izotóp β^+ -bomlása után keletkező protongazdag páros Z -jú magban $B_{2p} < B_p$. Ilyen esetekben elképzelhető lehetne késleltetett diprotonok emissziója. A könnyű magok tartományára kiterjedő számítások [13, 32] azonban azt bizonyítják, hogy ez a bomlásmód csak annyira erősen protongazdag izotópok β^+ -bomlásánál fordulhatna elő, melyek már $p^{(g)}$ -instabilisak és ezért nem képesek β^+ -bomlásra.

A késleltetett $2p$ -bomlásnak a közepes és nehéz magok tartományában való további elméleti vizsgálatára van szükség ahhoz, hogy ezen bomlásmód létezéséről vagy nem-létezéséről a végső szót kimondhassuk. Ezekben a mag-tartományokban a késleltetett diprotonemisszió egyik legnagyobb akadálya az, hogy a Γ_{2p} nivószélességek sokkal gyorsabban csökkennek a gerjesztési energia csökkenésével, mint a Γ_p nivószélességek. Ez egyrészt a késleltetett p -bomlás konkurrenciájának megjelenéséhez, másrészt a radiációs-átmenet konkurrenciájának jelentős erősödéséhez vezet. Így nagyon valószínű, hogy a késleltetett $2p$ -bomlás — ha egyáltalán létezik — olyan ritka, hogy csak kísérleti úton történő, véletlenszerű felfedezése elképzelhetetlen.

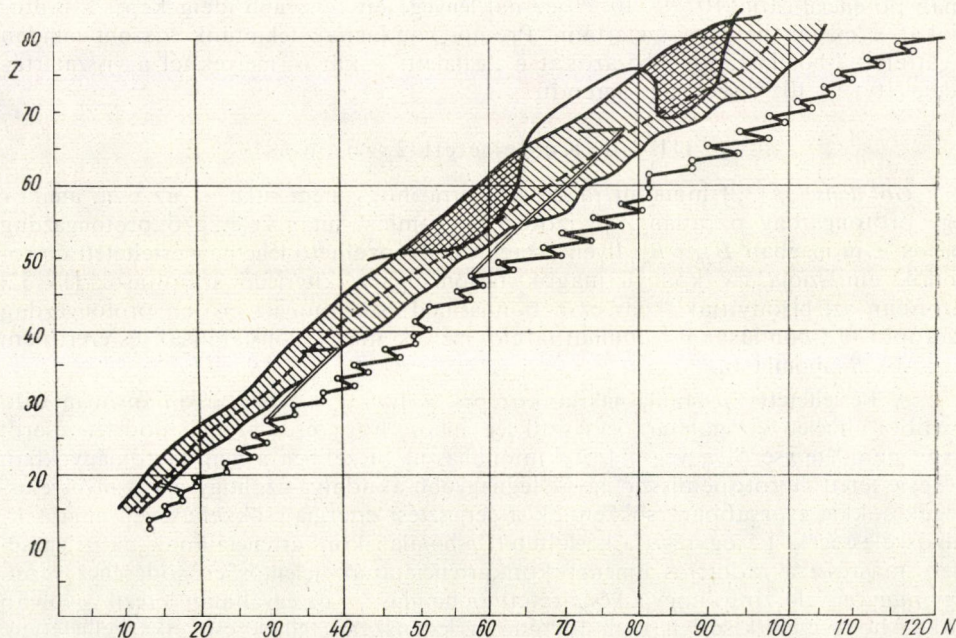
III. 2. e. $p^{(m)}$ -bomlás

Ismeretes, hogy a nehéz ionokkal létrehozott magreakciókban nagy valószínűséggel keletkeznek ún. konfigurációs izomer állapotban található magok [37]. A konfigurációs nivókat szokatlanul magas spin-érték jellemzi, ami a nem párbaálló, egy héjon belül elhelyezkedő nukleonok kölcsönhatásának eredményeként jön létre. A konfigurációs izomerek teljes gerjesztési energiája ui. csak néhány — leg-

külső — nukleon gerjesztésére fordítódik, ami miatt ezek nem képesek nukleon-párokat alkotni. A nagy spin-érték teszi lehetővé, hogy a konfigurációs izomerek képesek nehéz részek emittálására, amire a legszebb példa az α -aktív Po^{212m} [38] és a spontán hasadó Am^{242m} [39] esete.

Proton-aktív konfigurációs izomer állapotok létezésének lehetőségét, saját kísérleti eredményük interpretálására, a dubnai csoport tagjai vetették fel [33]. Egy protongazdag konfigurációs izomer akkor lehet $p^{(m)}$ -instabil, ha $E^* > B_p$. Mivel az izomer állapot nagy spin-értéke megtiltja a radiációs átmenetet, ezért a mag egy $E_p = E^* - B_p$ energiájú proton emissziója révén fog elbomlani. A Coulomb- és centrifugál-gát közös hatása ugyanekkor jelentős élettartamot biztosít az izomernek a p -emisszióval szemben.

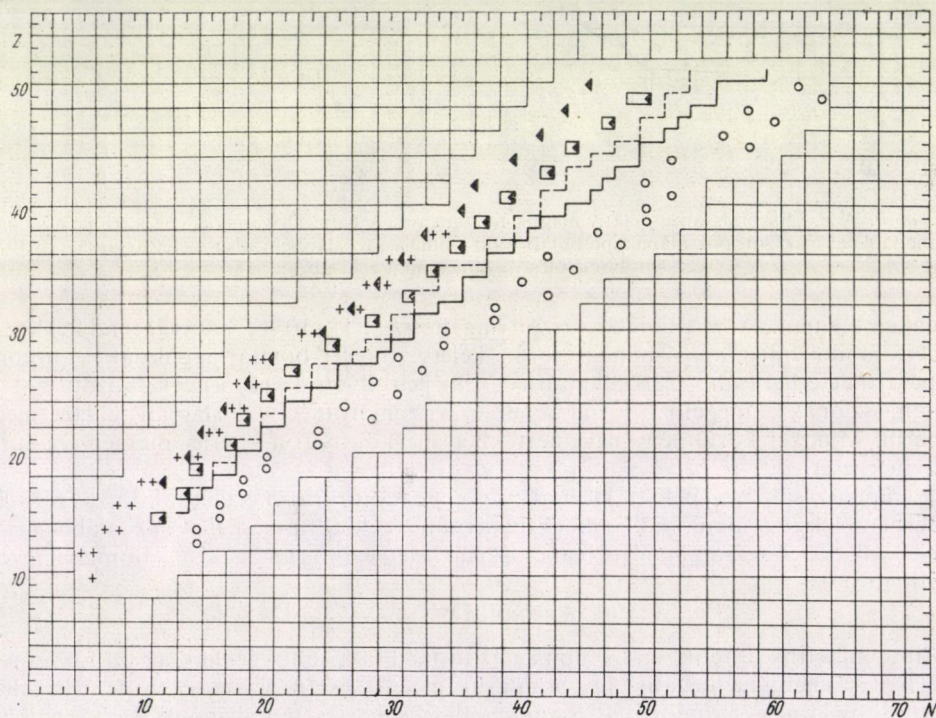
A $p^{(m)}$ -bomlás elmélete még alapjaiban sincs kidolgozva, így egyáltalán nem lehet megjósolni azokat az izotópokat, amelyeknek proton-aktív izomerjei lehetnek. A Po^{212m} analógiájára azonban ilyen izotópok létezését reális lehetőségként kell kezelnünk, annak ellenére, hogy *Gol'danskij* [26] a $p^{(m)}$ -bomlást, mint a dubnai kísérleti eredmények egyikének interpretálását, meggyőzőnek látszó indokok alapján elvetette.



3. ábra. A p-aktív magok NZ-síkban ábrázolt tartománya ferdén vonalkázott. A p-bomlás tartományának jobboldali határa azokon az izotópokon halad át, amelyekre $\Delta p = E_\beta + -(E_{p0} + B_p) \approx 0$. A másik határvonal oly módon lett meghatározva, hogy tőle balra csak olyan izotópok találhatók, melyekre az alapállapotból történő p-emisszióval szembeni átlagos élettartam, $\tau_p < 10^{-10}$ sec. A szaggatott vonalon találhatók azok a páratlan Z-jű magok, amelyekre $\tau_p \approx 10^{-1}$ sec. Az eredményvonalon azok az izotópok helyezkednek el, melyekre az alapállapotból történő α -bomlással szembeni átlagos élettartam, $\tau_\alpha \approx 10^{-1}$ sec. Az elemek legkönnyebb stabil izotópjait vastag, tört vonallal összekötött köröcskék jelzik. Nyilak ábrázolják néhány p-aktív mag előállítási módját gyorsított Ne^{20} és Ca^{40} ionokkal létrehozott magreakciókban. [18].

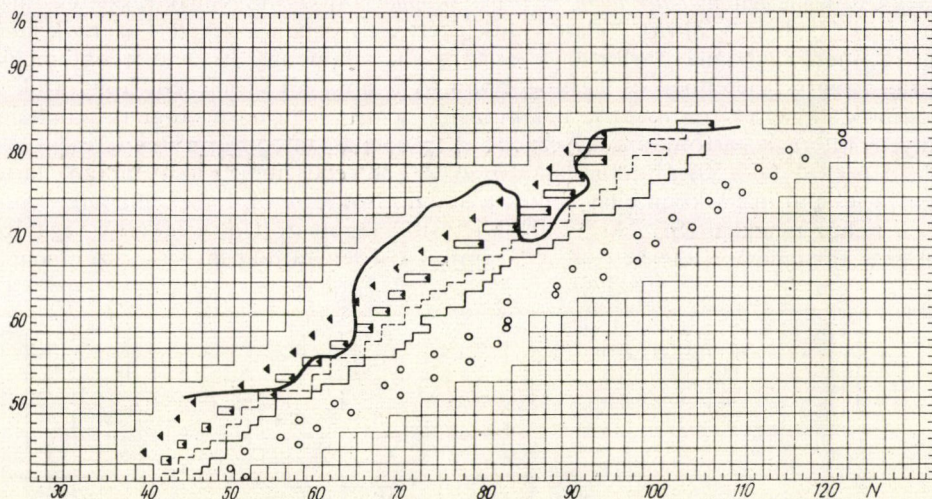
III. 3. A p -bomlás tartománya

Most, miután megismerkedtünk a p -bomlás lehetséges mechanizmusával, s ismerjük azokat a feltételeket, amelyek mellett az egyes bomlásmódok realizálódhatnak, hasznos lehet a számítások konkrét eredményeinek ismerete. Ezt az igényt igyekszünk kielégíteni *Karnauhov* és *Tyer-Akopján* [18] számításainak részletes ismertetésével (3., 4. és 5. ábra). Választásunk azért esett éppen a nevezett szerzők munkájára, mert a p -bomlás tartományát ez tárgyalja valamennyi hasonló jellegű munka közül a legrészletesebben és legátfogóbban. A 3. ábra jól szemlélteti, hogy azok az izotópok, amelyek radioaktív átalakulásuk során protonokat fognak emittálni, milyen kiterjedt tartományt képeznek. A p -bomlás tartománya részletesen a 4. ($Z < 50$) és 5. ($Z > 50$) ábrákon látható. A $Z > 50$ rendszámú p -aktív magok tartománya jelentős mértékben eltávolodott a stabilis izotópoktól. Ennek ellenére elegendően nehéz ionokkal (Si^{28} , Ar^{36} , Ca^{40} , Ni^{58} stb.) létrehozott magreakciók segítségével ez a tartomány is elérhető. A $p^{(g)}$ -bomlás kísérleti tanulmányozása szempontjára



4. ábra. A $Z < 50$ rendszámú p -aktív magok tartománya. A körök — az elemek legkönnyebb stabil izotópjai. A folytonos lépcsős vonalon halad keresztül, amelyekre $\Delta p = E_{\beta+} - (E_{p0} + B_p) \approx 0$. Azok a magok, amelyekre $E_{\beta+} = 2(E_{p0} + B_p)$, a szaggatott lépcsős vonalon találhatók. Befeketített háromszögekkel vannak jelölve azok az izotópok, amelyekből kezdve $\tau_p \leq 10^{-1}$ sec. Azok a páratlan Z -jú magok, melyeknek az alapállapotból történő p -bomlással szembeni élettartamuk a $10^{-10} - 10^{-1}$ sec tartományba esik, négyszögekben találhatóak. Keresztek jelzik azokat az izotópokat, amelyeknél nincs kizárva a $2p$ -bomlás lehetősége. [18].

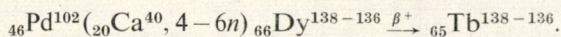
ból figyelemre méltó lehetőségre mutatott rá *Karnauhov és Tyer-Akopján* [18]. Eszerint a $Z = 59-71$ intervallumba eső, páratlan rendszámú $p^{(g)}$ -instabil magokat (ezeknél az α -bomlás konkurrenciája elhanyagolható), a megfelelő, páros Z -jű anyamagok β^+ -bomlása révén is elő lehet állítani, nem csupán közvetlenül, mag-



5. ábra. A $Z > 50$ rendszámú p -aktív magok tartománya. A folytonos sima görbe jelzi azt a határt, amelytől balra az izotópok alapállapotból történő α -bomlással szembeni átlagos élettartama, $\tau_\alpha < 10^{-1}$ sec. A többi jelölés ugyanaz, mint a 4. ábrán. [18].

reakciók útján. A β^+ -bomlás viszonylag hosszú, 1–10 sec nagyságrendű felezési ideje módot adna a β^+ -bomlás során keletkező, $p^{(g)}$ -bomló magoknak a protonspektrométerhez való „elszállítására”. Emellett ilyen körülmények között τ_p -t a p -emisszióknak a megelőző β^+ -átmenethez viszonyított késése alapján lehetne megmérni. Mindkét körülmény nagymértékben megkönnyíti a kísérlet megtervezését és kivitelezését.

Befejezésül egy példát idézünk az elmondottakra. Feladatunk a ${}^{65}\text{Tb}^{136-138}$ mérhető felezési idejű, $p^{(g)}$ -radioaktív izotópok előállítása. Ez pl. az alábbi magreakciók létrehozása, majd a reakciókban keletkező végmagok β^+ -bomlása révén oldható meg:



Mint említettük, a fenti Tb-izotópok $p^{(g)}$ -instabilisak, tehát bennük az utolsó proton B_p kötési energiája negatív. Így bomlásuk még az esetben sem tekinthető késleltetett p -bomlásnak, ha nem alap-, hanem valamely gerjesztett állapotukból történik is.

III. 4. Kísérleti eredmények a p -bomló magok tanulmányozásában

A legutóbbi években számos eredményes próbálkozás történt p -bomló magok előállítására és a p -bomlás tulajdonságainak kísérleti vizsgálatára. Nagyon valószínű, hogy valamennyi eddig identifikált p -sugárzó mag egy megelőző β^+ -bomlás

útján jön létre. A könnyű magok tartományában kilenc (C^9 [40], O^{13} [41], Ne^{17} [33, 41, 42, 43], Mg^{21} [33, 41, 44], Si^{25} [41, 44], S^{29} [45], Ar^{33} [46], Ca^{37} [46, 47], Ti^{41} [46]), a középesekében egy (Kr^{70-72} [33]), a nehezekében pedig két (Te^{108} [48], $Te^{109-111}$ [49]) késleltetett p -sugárzó izotóp felfedezését tekinthetjük többé-kevésbé véglegesnek.

Megemlítjük, hogy a $\beta^+ - p$ -bomlás kísérleti tanulmányozásán kívül történt már próbálkozás más bomlás—mechanizmus észlelésére is. Így *Karnauhov és Lu-Szintin* [50] megpróbálták előállítani a $2p$ -bomló Ne^{16} magot, s detektálni annak bomlását. A dubnai 310 cm-es ciklotronban Ni targetet sugároztak be ~ 150 MeV energiájú Ne^{20} ionokkal. A $4n$ -átadási reakcióban keletkező Ne^{16} magokat egy speciálisan kiképzett kamrában elhelyezkedő fotoemulzióba „terelték”. A terelést a ciklotron mágneses terével valósították meg. Ilyen kísérleti feltételek mellett egyetlen $2p$ -bomlást sem sikerült regisztrálniuk. Ennek az eredménynek a következő magyarázatai lehetségesek: 1. ha a Ne^{16} élettartama $\tau_{2p} \cong 10^{-8}$ sec, a $2p$ -bomlás energiája pedig $E_0 > 1$ MeV, akkor az effektus hiánya azt jelenti, hogy a Ni (Ne^{20} , Ne^{16}) reakció hatáskeresztmetszete $\leq 1,8 \cdot 10^{-30}$ cm²; vagy 2. a Ne^{16} élettartama $\tau_{2p} < 10^{-8}$ sec.

Az a tény, hogy ezek az eredmények mind az elmúlt két év folyamán születtek, világosan mutatja, hogy a p -bomlás kísérleti tanulmányozásában még a kezdet kezdetén tartunk. A kutatás azonban óriási intenzitással folyik, s bizonyára nincs messze az idő, amikor a p -bomlás a kísérleti magfizikai kutatás olyan hathatós eszközévé válik, amelynek segítségével a protongazdag izotópok ma még teljesen ismeretlen tartománya tanulmányozható. Meg van az alap arra, hogy ezekről a kutatásokról számos új, esetleg váratlan információt remélhessünk a maganyag tulajdonságait illetően.

IRODALOM

- [1] L. W. Alvarez, Phys. Rev., 75, 1815, 1949.
- [2] W. H. Barkas, Phys. Rev., 55, 691, 1939.
- [3] L. W. Alvarez, Phys. Rev., 80, 519, 1950.
- [4] A. C. Birge, Phys. Rev., 85, 753, 1952.
- [5] S. W. Breckon, A. Henrikson, W. M. Martin, J. S. Foster, Can. J. Phys., 32, 223, 1954.
- [6] Б. С. Дзелепов, Изв. АН СССР, серия физ., 15, 496, 1951.
- [7] В. А. Карнаухов, Препринт ОИЯИ Р-374, Дубна, 1959.
- [8] В. А. Карнаухов, Н. И. Тарантин, ЖЭТФ, 39, 1106, 1960.
- [9] А. И. Базь, АЭ, 6, 571, 1959.
- [10] Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ, 38, 1123, 1960.
- [11] В. И. Гольданский, ЖЭТФ, 39, 497, 1960. Nuclear Physics, 19, 482, 1960.
- [12] А. И. Базь, В. И. Гольданский, Я. Б. Зельдович, УФН, 72, 211, 1960.
- [13] J. Jänecke, Preprint KFK-185, Karlsruhe, 1963; Nuclear Phys., 61, 326, 1965.
- [14] А. И. Базь, Я. А. Смордиский, УФН, 55, 215, 1955.
- [15] Berényi D., Fiz. Szemle, 13, 263, 1963.
- [16] E. Feenberg, G. Trigg, Rev. Mod. Phys., 22, 399, 1950.
- [17] В. И. Гольданский, (Кézirat, 1964; megjelenésének helye és ideje ismeretlen);
- [18] В. А. Карнаухов, Г. М. Тер-Акопян, Препринт ОИЯИ Р-1706, Дубна, 1964; Phys. Lett., 12, 339, 1964; ЯФ, 1, 61, 1965.
- [19] A. G. W. Cameron, Can. J. Phys., 35, 1021, 1957.
- [20] A. G. W. Cameron, AECL-CRP-690, Chalk River (Canada), 1957.
- [21] J. D. Fox, C. F. Moore, D. Robson, Phys. Rev. Lett., 12, 198, 1964.
- [22] G. T. Garvey, J. Cerny, R. H. Pehl, Phys. Rev. Lett., 12, 726, 1964.
- [23] V. I. Goldansky, Nuclear Phys., 27, 648, 1961.

- [24] *H. A. Власов*, АЭ, 14, 45, 1963.
- [25] *Г. Н. Флеров, В. А. Карнаухов*, Препринт ОИЯИ Д-1798, Дубна, 1964.
- [26] *В. И. Гольданский*, Препринт ИХФ АН СССР А-33, Москва, 1964; ДАН СССР, 157, 321, 1964.
- [27] *P. H. Stelson, W. M. Preston*, Phys. Rev., 83, 469, 1951.
- [28] *Г. Ф. Богданов, Н. А. Власов, С. П. Калинин, Б. В. Рыбаков, В. А. Сидоров*, АЭ, 3, 204, 1957.
- [29] *H. A. Bethe*, Rev. Mod. Phys., 9, 66, és 72, 1937.
- [30] *V. I. Goldanskii*, Phys. Lett., 14, 233, 1965.
- [31] *V. M. Galitsky, V. F. Cheltsov*, Nuclear Phys., 56, 86, 1964.
- [32] *В. И. Гольданский*, ДАН СССР, 146/в, 1309, 1962.
- [33] *Флеров, В. А. Карнаухов, Г. М. Тер-Акопьян, Л. А. Петров, В. Г. Субботин*, Препринт ОИЯИ Д-1570, Дубна, 1964; ЖЭТФ, 47, 419, 1964. Nuclear Phys., 60, 129, 1964.
- [34] *Г. Р. Кипин*, АЭ, 4, 250, 1958.
- [35] *В. В. Волков, Л. Поморский, Я. Тыс, Г. Н. Флеров*, Препринт ОИЯИ 1192, Дубна, 1963.
- [36] *Л. А. Петров*, Препринт ОИЯИ Р-1863, Дубна, 1964.
- [37] *В. И. Гольданский, Л. К. Пекер*, УФН, 73, 631, 1961.
- [38] *В. А. Карнаухов*, ЖЭТФ, 42, 973, 1962. *I. Perlman, F. Asaro, A. Ghiorso, A. Larsh, R. Latimer*, Phys. Rev., 127, 917, 1962; *Б. С. Дзюленов, Л. К. Пекер, В. О. Сергеев*, Схемы распада радиоактивных ядер ($A \geq 100$), ИАН СССР, Москва—Ленинград, 1963.
- [39] *Г. Н. Флеров, С. М. Поликанов*, Препринт ОИЯИ Д-1799, Дубна, 1964.
- [40] *J. C. Hardy, R. I. Verrall, R. Barton, R. E. Bell*, Phys. Rev. Lett., 14, 376, 1965.
- [41] *R. Barton, R. McPherson, R. E. Bell, W. R. Frisken, W. T. Link, R. B. Moore*, Can. J. Phys., 41, 2007, 1963.
- [42] *J. M. D'Auria, I. L. Preiss*, Phys. Lett., 10, 300, 1964.
- [43] *R. McPherson, J. C. Hardy, R. E. Bell*, Phys. Lett., 11, 65, 1964.
- [44] *R. McPherson, J. C. Hardy*, Can. J. Phys., 43, 1, 1965.
- [45] *J. C. Hardy, R. I. Verrall*, Phys. Lett., 13, 148, 1964.
- [46] *P. L. Reeder, A. M. Poskanzer, R. A. Esterlund*, Phys. Rev. Lett., 13, 767, 1964.
- [47] *J. C. Hardy, R. I. Verrall*, Phys. Rev. Lett., 13, 764, 1964.
- [48] *A. T. Siivola*, Phys. Rev. Lett., 14, 142, 1965.
- [49] *В. А. Карнаухов, Г. М. Тер-Акопьян, Л. А. Петров, В. Г. Субботин*, Препринт, ОИЯИ Р-1865, Дубна, 1964.
- [50] *В. А. Карнаухов, Лу Си-тин*, Препринт ОИЯИ Р-1679, Дубна, 1964; ЖЭТФ, 47, 127, 1964.

MOLEKULÁK KÖZÖTTI KÖLCÖNHATÁSOK VIZSGÁLATA A RAMAN SPEKTROSKÓPIA MÓDSZERÉVEL*

PINTÉR FERENC

József Attila Tudományegyetem Kísérleti Fizikai Intézete, Szeged

A jelen dolgozat rövid összefoglalást nyújt a Raman spektroszkópia egy új alkalmazási lehetőségéről, a molekulák közötti kölcsönhatások vizsgálatával kapcsolatosan. A szerző kísérleti vizsgálatai [23, 24, 25] azt mutatják, hogy a gázok tiszta rotációs vonalainak kiszélesedése a gáz nyomásán kívül a rotációs kvantumszámoktól is függ. A vonalkiszélesedést, illetve a vonalkiszélesedésből számított ütközési paraméterek értékét a molekulák közötti különböző multipólus-kölcsönhatásokkal (kvadrupólus-kvadrupólus és diszperziós kölcsönhatásokkal) hozzuk kapcsolatba. Az elméletileg számított és a kísérleti adatokból nyert ütközési paraméterek értékei kielégítő egyezést mutatnak. Az észlelt effektus a kölcsönhatás következtében a különböző rotációs állapotok közötti indukált átmenetekkel értelmezhető.

A tiszta vibrációs átmeneteknek megfelelő Q-ágak kísérleti vizsgálatai [18, 19, 26] szerint a Q-ágak aszimmetrikus kontúrral rendelkeznek, és szélességük a gáz nyomásától nem függ. Az aszimmetrikus kontúr és szélességét a rotáció és vibráció kölcsönhatásának figyelembevételével értelmezzük. A Q-ágak rotációs komponenseinek kiszélesedése jelentéktelen, ami arra mutat, hogy a rotációs energiaszintek nem, vagy csak kismértékben perturbálódnak.

Bevezetés

A Raman-effektusról általában

1923-ban *Smekal* [1] megjósolta, hogy monokromatikus beeső fénysugár esetén a szórt fény spektrumának különböznie kell az eredetitől, azaz a spektrumban a beeső fénysugár spektrumvonalán kívül hosszabb és rövidebb hullámhosszú vonalak is fellépnek. *Raman* — indiai fizikus — [2] 1928-ban víz és még néhány folyadék esetén kimutatta ezeket az új spektrumvonalakat. Gerjesztésre a napfényt használta, alkalmas szűrőn való átbocsátás után, és a szórt fényt, illetve ennek spektrumát vizuálisan figyelte meg. *Ramannal* egyidőben, *Landsberg* és *Mandelstam* [3] — orosz fizikusok — kvarckristály vizsgálatokkor figyelték meg új vonalak jelenlétét. Ezek az új vonalak — a Raman-vonalak —, amelyek a monokromatikus gerjesztő fény spektrumában nem szerepelnek, a molekulák vibrációjával, illetve rotációjával hozhatók kapcsolatba; a Raman-vonalak frekvenciájának a beeső fény frekvenciájától való eltérése a szóró közegre jellemző.

Ezeknek az új vonalaknak a megjelenését — a Raman-effektust — élesen el kell különíteni a fluoreszcenciától. Mint ismeretes, monokromatikus gerjesztés esetén az emittált fluoreszcenciafény spektruma egy meglehetősen széles és a gerjesztő fény hullámhosszától alig függő spektrális helyzetű sávot alkot, míg a Raman-szórás esetén sáv vagy sávok nem jelennek meg, és a szórt fény hullámhossza a gerjesztő fényével együtt változik. Másrésről a polarizációs viszonyok tekintetében is erős eltérés mutatkozik.

* Érkezett 1965. dec. 18.

A Raman-effektus a fényszórás folyamata alatti molekuláris átmenetek következtében jön létre. Az effektus magyarázatát a kvantumelmélet adja, amelyet egyszerűsített alakban az energianívók diagramjának segítségével vizsgálhatunk. A szórásnál a tetszőleges ν_0 frekvenciájú és $h\nu_0$ energiájú fénkvantum „ütközik” a molekulával, amely eredetileg valamilyen stacionárius állapotban van, mondjuk az E'' energiájú állapotban, és így a molekulának a $h\nu_0 + E''$ energiájú állapotba kellene átmennie.¹ Ha azonban a molekulának nincsen $E'' + h\nu_0$ energiájú stacionárius állapota, akkor a fénkvantum azonnal emittálódik (tetszőleges irányba) és a molekula a $h\nu_0 + E''$ „virtuális állapotból” visszajut vagy a kiinduló E'' , vagy pedig egy ettől eltérő E' stacionárius állapotba. Ha a molekula az eredeti, E'' állapotába kerül, a fénkvantum nem veszít energiájából, következésképpen a frekvenciája megegyezik az ütközés előtti frekvenciával; ily módon megy végbe az ún. Rayleigh-féle szórás. Ha viszont a molekula egy az eredetitől eltérő E' állapotba tér vissza, akkor a molekula vagy kap egy bizonyos nagyságú energiát a fénkvantumtól, vagy pedig bizonyos nagyságú energiát át ad a fénkvantumnak. Következésképpen,

ha a fénkvantum frekvenciája változik, úgy ez a változás $\frac{E'' - E'}{h} = \frac{\Delta E}{h}$, és ez pozitív vagy negatív attól függően, hogy $E'' > E'$ vagy $E'' < E'$. Mivel pedig E'' helyett E' is lehet a kiinduló állapot, a szórt fényben az eredeti ν_0 frekvenciával együtt megjelennek a $\nu_0 + \frac{\Delta E}{h}$, és a $\nu_0 - \frac{\Delta E}{h}$ frekvenciák, vagyis végbemegy a

Raman-szórás. Azokat a Raman-vonalakat, amelyeknek a frekvenciája kisebb, mint a Rayleigh-szórás vonalának frekvenciája — stokesi, amelyeké pedig nagyobb, azokat anti-stokesi-vonalaknak nevezzük. A Raman-vonalaknak a beeső fényhez viszonyított, cm^{-1} -ben kifejezett spektrális eltolódásai a molekula energiaállapotai közötti ΔE energiakülönbségeknek felelnek meg. A Raman-szórás spektrumában tehát csak olyan vonalak jelenhetnek meg, amelyek a különböző rotációs, vibrációs és elektron-nívók közötti átmenetek következményei. A leggyakrabban vizsgált esetek a rotációs és vibrációs átmenetek. A rotációs Raman-effektusnál a tapasztalat szerint a kétatomos molekulák j rotációs kvantumszáma $\Delta j = \pm 2$ -vel változik meg. A vibrációs Raman-effektusnál a vibrációs kvantumszám változása $\Delta v = 1$.

A közbeeső energiaszint ($h\nu_0 + E''$) — mint ahogy már említettük — a molekulának nem stacionárius állapota, de ezt az állapotot le lehet írni a perturbáció elmélete segítségével az összes lehetséges stacionárius állapotok szuperpozíciójaként, vagyis az összes elektron-, vibrációs, rotációs nívók sajátfüggvényei segítségével. Következésképpen ahhoz, hogy meg tudjuk határozni az átmenetek valószínűségét és a kiválasztási szabályokat, feltétlenül ismernünk kell ezeket a nívókat.

A polarizációs elmélet, amelyet Placzek [4] állított fel, nagyon leegyszerűsítette ezt a problémát. Placzek a polarizálhatóság fogalmát általános módon vezette be. A gerjesztő fénkvantum \vec{E} elektromos vektora a molekulában létrehoz egy \vec{P} indukált momentumot

$$|\vec{P}| = |\alpha| \cdot |\vec{E}|,$$

¹ Ha a molekula a $h\nu_0 + E''$ energiával stacionárius állapotba kerül, akkor a fénkvantum abszorbeálódik, és a molekula gerjesztett állapotba jut. Bizonyos idő elteltével ez a fénkvantum kisugárzódhat, ugyanazzal a ν_0 frekvenciával vagy egy más frekvenciával attól függően, hogy a molekula az eredeti állapotába, vagy attól eltérő állapotba jut. Ezt a folyamatot fluoreszcenciának nevezzük.

ahol $|\alpha|$ a polarizálhatóság. Az általános esetben a \vec{P} vektor komponensei a következő kifejezéssel adhatók meg:

$$P_x = \alpha_{xx}E_x + \alpha_{xy}E_y + \alpha_{xz}E_z$$

$$P_y = \alpha_{yx}E_x + \alpha_{yy}E_y + \alpha_{yz}E_z$$

$$P_z = \alpha_{zx}E_x + \alpha_{zy}E_y + \alpha_{zz}E_z.$$

Itt $\alpha_{xx}, \alpha_{xy}, \dots$ az $|\alpha|$ polarizálhatósági tenzor komponensei a molekulához rögzített xyz koordináta-rendszerben. Az $|\alpha|$ polarizálhatóság szimmetrikus tenzor ($\alpha_{xy} = \alpha_{yx}$ stb.), és egy molekulához rögzített főtengekkel rendelkező ellipszoidot határoz meg. Az említett főtengeknek az irányában a \vec{P} és \vec{E} vektorok irányai megegyeznek, általában azonban \vec{P} és \vec{E} nem párhuzamosak, az egyenletnek megfelelően. Ha a töltések eloszlása a molekulák szimmetriatengelyeire nézve szimmetrikus, akkor a polarizálhatósági ellipszoid egyes tengelyei e szimmetriatengelyekkel egybeesnek. Ily módon, a molekula tetszőleges szimmetriatengelye a polarizálhatósági ellipszoid főtenge is, és tetszőleges szimmetriasík az ellipszoid két tengelyét tartalmazza. Amikor az ellipszoid mindhárom főtenge egyenlő nagyságú, mint ahogy ez gömbszimmetrikus molekulák esetében fennáll, izotróp polarizálhatóságról beszélünk. Azon esetekben, amikor legalább kettő különböző, pl. lineáris molekulák, szimmetrikus és aszimmetrikus pörgettyű típusú molekulák esetében, anizotróp polarizálhatóságról beszélünk.

Általános esetben az $|\alpha|$ polarizálhatósági tenzor a determinánstól eltekintve két invariánssal rendelkezik, amelyek közül az egyik, α^i , a polarizálhatóság gömbi vagy izotróp részét képezi, a másik, β , az anizotróp részt. Ezeket a következő alakban állítják elő:

$$\alpha^i = \frac{1}{3} (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz})$$

és

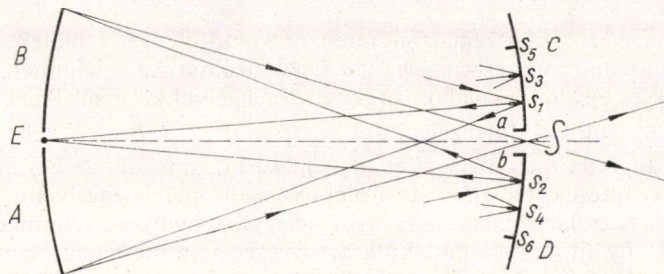
$$\beta^2 = \frac{1}{2} [\alpha_{xx} - \alpha_{yy}]^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2 + 6(\alpha_{xy}^2 + \alpha_{yz}^2 + \alpha_{zx}^2).$$

Világos, hogy a polarizálhatóság a különböző rotációs és vibrációs mozgások következtében változni fog. A polarizálhatóságnak ez a változása okozza a Raman-szórás. A Raman-szórás megfigyelhető mind poláros, mind nem poláros molekulák esetében, ellentétben az infravörös területen jelentkező abszorpciós vonalakkal, amelyek csak akkor jelennek meg, ha a molekula *állandó dipólus-momentummal* rendelkezik. Tehát a Raman-szórás, amely a *változó polarizálhatóság* következménye, kiterjeszti a vizsgálatokat a nem poláros molekulákra is.

A Raman-effektussal kapcsolatos vizsgálatok jelentős része csak a molekulák — fentiekben említett — rotációs és vibrációs energiaszintjeinek meghatározására szorítkozik. A kísérleti berendezések fejlődése lehetővé tette a különböző rotációs kvantumszámmal rendelkező Raman-vonalak kiszélesedésének (alakjának) vizsgálatát is. A jelen vizsgálat célja a kiszélesedés alapján a molekulák közötti kölcsönhatások (kvadrupólus-kvadrupólus; diszperziós) típusainak, illetve ezek fizikai jellemzőinek (ütközési paramétereinek) meghatározása.

Kísérleti berendezés

Gázállapotú anyagok Raman-spektrumainak kísérleti vizsgálata nagyon nehéz feladat a szórt fény kis intenzitása miatt. A legutóbbi időkig a gázok Raman-spektrumát kizárólag fotografikus módszerrel regisztrálták. A rotációs szerkezet felbontására nagy diszperziójú spektrográfokat alkalmaztak, amelyek általában kis fényerővel rendelkeznek. Alig néhány évre tehető a fotoelektromos módszer használata a rotációs, vibrációs és rotációs-vibrációs vonalak intenzitásának, szélességének és kontúrjának mérésére.



1. ábra

A kísérleteket DFSz-4-es regisztrálás spektrofotométeren végeztük el. A spektrofotométer monokromátorának diszperziója $6,4 \text{ \AA/mm}$. A rács elfordulásának sebességét (v), a $v\tau \ll \delta_g$ feltételből határoztuk meg, ahol τ a regisztráló készülék időállandója, δ_g (cm^{-1} -ben) a gerjesztővonal megfigyelt szélessége. A rotációs vonalak esetében $v = 2 \text{ cm}^{-1}/\text{perc}$, a vibrációs vonalak esetében $v = 3,6 \text{ cm}^{-1}/\text{perc}$ sebességgel dolgoztunk.

A szórt fény kis intenzitása és a fotoelektromos regisztrálás miatt az 1. ábrán látható sokszoros visszaverődésű tükrös küvetta használtunk [5]. A tükrös küvetta egy elülső (C, D) és egy hátsó (A, B), azonos görbületi sugárral rendelkező gömbtükrökből áll. A hátsó tükrő félbe van vágva, és mindkét féltükrő elforgatható. Az elülső tükrön egy 35 mm magas és 0,5 mm széles rés van. A négy, azonos optikai adatokkal rendelkező tükröt úgy kell beállítani, hogy a C és D tükrök görbületi középpontjai az E-vél jelölt pontba, az A és B tükrök görbületi középpontjai az a és b-vél jelölt pontokba essenek. Az a görbületi középpontú A tükrő az S részt a C tükrőn az S_1 helyre képezi le. Az S_1 réskép C-ről B-re, B-ről D-re, majd újra A-re reflektálódva, a folyamat megismétlődik. Ily módon ebben a négytükrös rendszerben az S résről az A tükrő az S_1, S_3, S_5, \dots , illetve a B tükrő az S_2, S_4, S_6, \dots résképeket hozza létre. Ismerve a tükrök R reflexiókoefficiensét és a résképek n számát, ki tudjuk számítani rendszerünk „effektivitását.” Ezt a következő kifejezéssel lehet megadni:

$$\Phi = \frac{1 - R^{2n}}{1 - R};$$

n nagy értékeinél $\Phi \approx \frac{1}{1 - R}$. A mi feltételeink között $n \approx 20$, $R = 0,98 - 0,99$ volt, és így módon $\Phi \approx 50$.

Ez azt jelenti, hogy kb. 50-szer nagyobb intenzitású szórt fény jutott be a spektrofotométerbe, mint tükrök nélkül. A célból, hogy közvetlenül a gerjesztő fényforrástól fény ne juthasson a spektrofotométerbe, a küvetta megfelelő módon diafragmákat helyeztünk el. Nagy figyelmet igényel a küvetta beállítása, ti. az, hogy milyen módon történjék a leképezés. Amint azt elméleti megfontolások alátámasztják [5], az optimális leképezésnek az felel meg, amikor a küvetta első részét a spektrofotométer belépő részére képezzük le, a hátsó tükröt pedig a kollimátortükrőre. Így módon a spektrofotométer „látja” az egész küvetta-térfogatot. Ez megfelelően választott két kondenzoros leképező rendszerrel biztosítható.

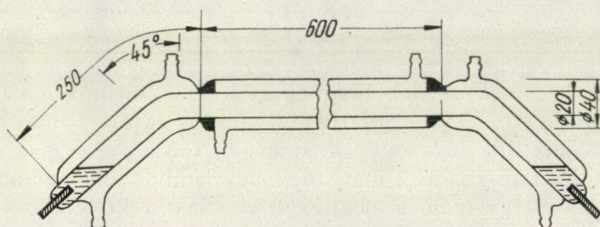
Gázok Raman-spektrumának felvételére alacsony nyomású higanygőz-lámpákat használnak. Egyik lényeges tulajdonságuk, hogy intenzív vonalas spektrummal rendelkeznek, amely alkalmas a fényszóródási effektusok vizsgálatára. Másik lényeges előnyük, hogy az alacsony nyomású higanygőz-lámpák laboratóriumi körülmények között is elkészíthetők [6].

A gerjesztésre legjobb felhasználni a $\lambda=4358 \text{ \AA}$ hullámhosszú vonalat. Ez intenzív és éles vonal. A vonal félértékszélessége, a készülék átviteli függvényével együtt, $2-3\mu$ széles bemenő és kilépő réssel regisztrálva $\approx 0,7 \text{ cm}^{-1}$. Gázok Raman-spektrumának felvételére egyik legalkalmasabb higanylámpa típusa a 2. ábrán látható. A folyékony Hg-elektrodokat $10-20^\circ\text{C}$ -on, a lámpa középső részét $50-60^\circ\text{C}$ hőmérsékleten tartja áramló hideg, ill. meleg víz. Ez utóbbi magasabb hőmérséklet azért fontos, hogy megakadályozzuk a Hg kondenzációját a kisülési cső falán. Az ilyen típusú higanygőz-lámpákat $10-40$ amperig lehet használni.

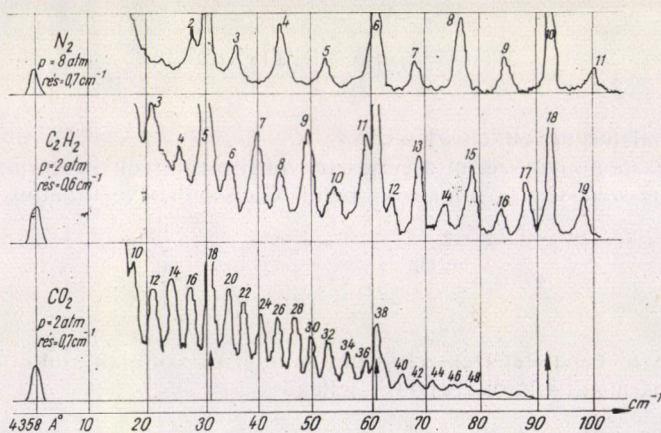
Detektálásra FEU-17 elektronsokszorozót (sötétáram $10^{-12}-10^{-13}$ amper) használtunk, amelyet gondosan kiválogattunk a jel/zaj viszony méréseivel [7]. Érdemes megjegyezni, hogy a jel/zaj viszony maximuma kb. $600-650 \text{ V}$ feszültségnél adódik, az előírt $1000-1100 \text{ V}$ munka-feszültség helyett. A sokszorozó áramát egyenáramú erősítővel erősítettük, és kompenzográffal regisztráltuk a spektrumokat.

I. TÁBLÁZAT

Molekula	N ₂	CO ₂	C ₂ H ₂
Kvadrupólus momentum $Q \cdot 10^{26} \text{ CGSE}$	1,49	3,1	5,3



2. ábra. Alacsony nyomású higanygőz lámpa



3. ábra. Többatomos molekulák rotációs spektrumai

A vizsgálatokat N₂, CO₂, C₂H₂ gázok és N₂+He, valamint CO₂+He gázkeverékek esetében végeztük el. A vizsgált gázok molekulái dipólus nélküli molekulák, de kvadrupólus momentummal rendelkeznek (lásd I. táblázat). A 3. ábrán az N₂, CO₂, C₂H₂ molekulák jól felbontott tiszta rotációs spektrumai láthatók.

A mérési eredmények kiértékelése

Amint a 3. ábrán látható, a CO_2 és C_2H_2 spektrumai erősen átfedik egymást egészen alacsony nyomásnál is, ugyanakkor az N_2 spektruma esetén még 10 atm nyomásnál is ez az átfedés elhanyagolható.

Amint ismeretes, a regisztrált spektrumvonal eltér a valódi spektrumvonaltól. A megfigyelt és valódi eloszlás különbözőségét nagyszámú ok idézheti elő: pl. a regisztráló készülék nem ideális készülék, és eltorzítja a valódi eloszlást, továbbá a fényforrás gerjesztő vonala nem szigorúan monokromatikus, hanem valamilyen félértékszélességgel rendelkezik stb. Olyan effektusokat, mint a Doppler-effektus, elhanyagolhatunk, mert amint egyszerű számítások mutatják, az ezekből eredő kiszélesedés igen kicsiny a nyomási kiszélesedéshez képest.

A valódi $\varphi(x)$ és a megfigyelt $f(x)$ eloszlás közötti kapcsolatot integrálegyenlettel adhatjuk meg [8]:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x') a(x-x') dx', \quad (1)$$

ahol $a(x)$ az adott készülék átviteli függvényét, $f(x)$ a monokromatikus sugárzás megfigyelt eloszlását jelöli; x a regisztrátum abszcisszáján a maximum helyétől mért távolság. A feladatunk az, hogy az ismert $f(x)$ és $a(x)$ segítségével a $\varphi(x)$ -et meghatározzuk. A Raman-szórás esetén még figyelembe kell vennünk a gerjesztő vonal $g(x)$ eloszlását is. Így tehát a megfigyelt eloszlást a következő módon adhatjuk meg:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} A(x-x') \varphi(x') dx', \quad (2)$$

ahol

$$A(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x-x') g(x') dx'$$

a gerjesztő vonal megfigyelt eloszlása.

A kísérletek tanúsága szerint a gerjesztő vonal megfigyelt kontúrját, elég nagy $(0,3-3 \text{ cm}^{-1})$ résszélesség tartományon belül, Gauss-görbével írhatjuk le:

$$A(x) = \frac{2(\ln 2)^{1/2}}{\pi^{1/2} \alpha_g} \exp \left\{ -\frac{4 \ln 2}{\alpha_g^2} x^2 \right\}, \quad (3)$$

ahol α_g a gerjesztő vonal félértékszélessége. A rotációs vonalak kontúrja, mint azt sok eredmény is mutatja, „diszperziós” jellegű:

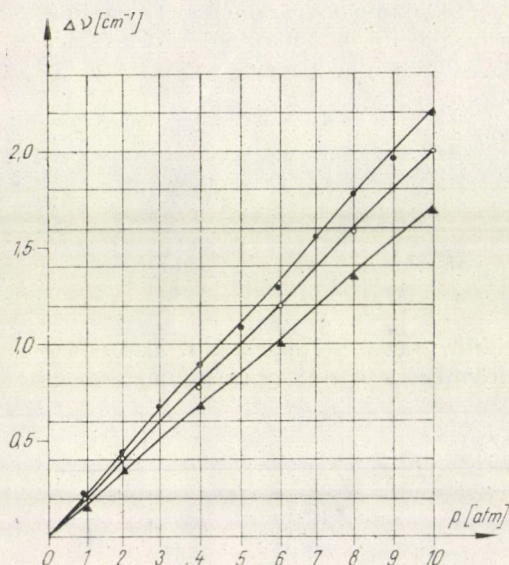
$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\alpha_d}{x^2 + \left(\frac{\alpha_d}{2}\right)^2}, \quad (4)$$

ahol α_d a rotációs vonal valódi félértékszélessége. Felhasználva a (2) (3) és (4)-et,

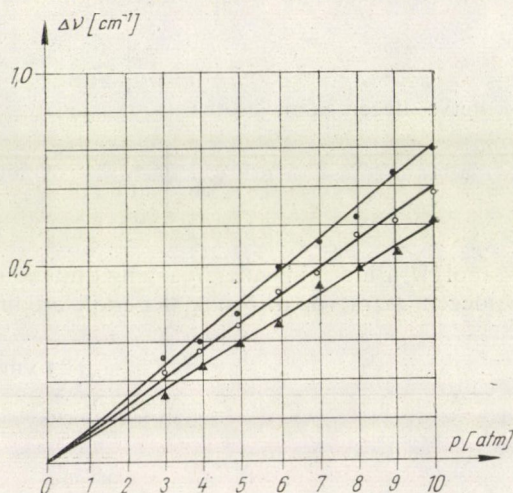
a megfigyelt eloszlásra kapjuk, hogy

$$f(x) = \frac{(\ln 2)^{1/2}}{\pi^{3/2}} \frac{\alpha_d}{\alpha_g} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp \left\{ \frac{4 \ln 2}{\alpha_g^2} y^2 \right\}}{(x-y)^2 + \left(\frac{\alpha_d}{2} \right)^2} dy, \quad (5)$$

ami nem más, mint az ún. Voigt-féle függvény [9].



4. ábra. A CO_2 különböző rotációs vonalainak kiszélesedése a nyomás függvényében (●— $j=22$; ○— $j=26$; ▲— $j=32$.)



5. ábra. Az N_2 különböző rotációs vonalainak kiszélesedése a nyomás függvényében (●— $j=4$; ○— $j=8$; ▲— $j=12$.)

Ha ismeretes α_g , és δ a megfigyelt félértékszélesség, kapcsolatot találhatunk $\alpha_d(\alpha_g, \delta)$ -ra, s így módon ismert adatok segítségével a rotációs vonalak valódi félértékszélességét meghatározhatjuk.

Abban az esetben, amikor a kiszélesedés következtében a vonalak erősen átfedik egymást, figyelembe kell venni a valódi α_d meghatározásánál a szomszédos vonalak áthatását és intenzitás-eloszlásaikat.

A kísérleti adatok azt mutatják, hogy a rotációs Raman-vonalak diszperziós eloszlásúak, és a szélességük lineárisan függ a gáz sűrűségétől.

Ezek az eredmények teljesen alátámasztják az ütközési elméletet a vonalak kiszélesedésére vonatkozólag. Mint ismeretes, az ütközési elmélet az intenzitásra diszperziós eloszlást ad, abban a szélső esetben, amikor a vonal félértékszélessége

$\frac{2}{\tau_0} \ll \omega_0$ [10]:

$$I(\omega) d\omega = \frac{d\omega}{\pi \tau_0 \left\{ (\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{1}{\tau_0} \right)^2 \right\}}, \quad (6)$$

ahol ω_0 a nem perturbált sugárzás rekvenciája, τ_0 két ütközés közötti idő. A $\Delta\nu = \frac{2}{\tau_0}$ vonal-szélességet cm^{-1} -ben a

$$\Delta\nu = \frac{Nvd^2}{c} \quad (7)$$

összefüggés szolgáltatja, ahol N az 1 cm^3 -ben levő molekulák száma, $v = \left(\frac{16RT}{\pi M}\right)^{1/2}$ a molekulák relatív sebessége, és d az ún. optikai impakt paraméter. Ez utóbbi azzal a maximális távolsággal egyenlő, amelyen belül ha „ütközés” történik, az ütköző molekulák perturbálják egymást. A (7)-ből kapjuk, hogy

$$\frac{\Delta\nu}{\Delta p} \left[\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{atm}} \right] = 0,50 \frac{d^2}{(MT)^{1/2}}, \quad (8)$$

illetve idegen gázok esetén

$$\frac{\Delta\nu}{\Delta p} \left[\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{atm}} \right] = 0,50 \frac{d^2}{\left(2 \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2}\right)^{1/2}} \quad (9)$$

ahol M a molekulasúly, T az abszolút hőmérséklet, az 1 és 2 indexek az alap és az idegen gázra vonatkoznak. Kísérleti eredményeinket a 4. és 5. ábra mutatja.

II. TÁBLÁZAT

Kölcsönható molekulák	Számított optikai impakt paraméter Å-ban			Kísérleti úton kapott opt. impakt paraméter (Å)	Vonalkiszélesedés $\frac{\Delta\nu}{\Delta p} \left[\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{atm}} \right]$
	Diszperziós	Kvadrupól	Eredő		
$\text{N}_2 - \text{N}_2$					
$j=4$	3,9	4,2	4,4	3,9	0,08
$j=8$	3,9	4,0	4,2	3,6	0,07
$j=12$	3,9	3,8	4,1	3,4	0,06
$\text{N}_2 + \text{He}$	2,1		2,1	2,2	0,053
$\text{CO}_2 - \text{CO}_2$					
$j=22$	5,0	6,4	7,2	7,2	0,22
$j=26$	5,0	6,2	6,3	6,8	0,20
$j=32$	5,0	6,0	6,1	6,4	0,17
$\text{CO}_2 + \text{He}$	2,5		2,5	2,7	0,077
$\text{C}_2\text{H}_2 - \text{C}_2\text{H}_2$					
$j=7$	5,1	8,6	8,6	8,2	0,39
$j=9$	5,1	8,5	8,5	8,0	0,37
$j=13$	5,1	8,1	8,1	6,9	0,28
$j=17$	5,1	7,8	7,8	6,3	0,23

A (8) és (9) összefüggéseket alkalmazták az optikai impakt paraméter meghatározására, függetlenül a kölcsönhatási törvényektől, amelyek a molekulák között hatnak. A d értéke azonban függ a kölcsönhatási erő típusától és az ütközés jellegétől.

A II. táblázatban a kísérleti eredményeket tüntettük fel. Amint látható:

1. A kiszélesedés és az optikai impakt paraméter a molekulák (más módszerrel mért) kvadrupólus-momentumának növekedésével növekszik, és a kiszélesedés erősen függ az ütköző molekulák természetétől. Így például az N_2 –He esetében az optikai impakt paraméter majdnem felére, a CO_2 –He esetében pedig harmadára csökken a tiszta N_2 , illetve CO_2 gázok esetében mért értékekhez képest. Hasonló effektus figyelhető meg más idegen gázokkal is (Ar, CH_4), és megállapítható, hogy a perturbáló molekula polarizálhatóságának növekedésével az impakt paraméter is növekszik.

2. Nagyon fontos megjegyezni, hogy az általunk vizsgált molekulák esetében a j rotációs kvantumszámtól is függ a kiszélesedés. Hasonló módon függ a j -től az impakt paraméter is.

3. A molekulák optikai impakt paraméterei felülmúlják a gázkinetikai átmérőt. Ez azt jelenti, hogy a kinetikus energia nem zavarja meg számottevően a sugárzás koherenciáját. Mivel az optikai impakt paraméterek nagyobbak a gázkinetikai átmérőknél, a molekulák mozgását kváziklasszikusnak tekinthetjük, azaz a molekulák majdnem egyenes pályán mozognak, és kinetikus energiájuk csak elenyészően kicsiny mértékben változik meg. Ha viszont az optikai impakt paraméter kisebb a gázkinetikai átmérőnél — pl. a H_2 esetében — akkor ütközések esetén a perturbáló molekula pályáját nem tekinthetjük kvázi-klasszikusnak, mivel ez a pálya közelítőleg két egyenes darabból tevődik össze.

A vonalak kiszélesedésének oka

Mint ismeretes, az emittáló és abszorbeáló molekula a környezetével kölcsönhatásban van. Olyan általános kifejezést a kölcsönhatási energiára, normális vagy gerjesztett állapotban, amely tetszőleges távolságra érvényes, nagyon nehéz találni. Abban az esetben, amikor a molekulák közötti elektrosztatikus kölcsönhatásnak részletes vizsgálata szükséges, a V potenciált az R hatványai szerinti sorba lehet fejteni, ami ekvivalens a különböző multipólus-kölcsönhatások vizsgálatával.

Az elméleti munkákban feltételezik, hogy a molekulák közötti erők távolbaható jellegűek, és a molekulák egyenes pályán mozognak. Azokban az esetekben, amikor az optikai impakt paraméter nagyobb a gázkinetikai átmérőnél, az ilyen feltételezésnek helye van, és a V potenciált explicit alakban meg lehet adni. Mivel vizsgálataink dipólus nélküli molekulákra terjedtek ki a dipólus-kölcsönhatástól eltekinthetünk, és más multipólus-kölcsönhatások (pl. kvadrupólus-kvadrupólus, diszperziós) figyelembevételével adhatunk magyarázatot a vonalak kiszélesedésére vonatkozóan.

A klasszikus Lorentz-féle elmélet [10], amelynek alapján d -t meghatároztuk, nem tartalmazza a molekulák közötti kölcsönhatásokat. Weisskopf [11] adiabatikus közelítésben próbálja megoldani a problémát. Adiabatikus közelítésnek azt a közelítést nevezzük, amelynél csak a fázis-eltolódást kell figyelembe venni a kölcsönhatás következményeképpen.

Weisskopf elméletében ez a fázis-eltolódás:

$$\Delta\theta(R) = \frac{\Delta\gamma}{R^n}, \quad (10)$$

ahol $\Delta\gamma$ az alap és gerjesztett állapotok kölcsönhatási együtthatóinak különbsége, R a molekulák egymástól való távolsága, n pedig a multipólus kölcsönhatások típusát jelenti. Effektívnek tekintjük a kölcsönhatást, ha

$$\Theta = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\gamma(R) dt \cong 1. \quad (11)$$

Lineáris trajektóriát feltételezve, a $\Delta\gamma(R)$ -ben szereplő R értékét a következő módon fejezhetjük ki: $R = (b^2 + v^2 t^2)^{1/2}$ (lásd a 6. ábrát), ahol v a molekulák relatív sebessége. Weisskopf szerint a sugárzás koherenciájának megszakadása akkor lép fel, amikor $\Theta \cong 1$. Ez önkényes feltétel, és csak a $\Theta = 1$ -nél kapott b_0 értékeket és a $b < b_0$ értékeket tekinti az ütközés szempontjából effektívnek, és a $b_0 < b$ értékeket nem veszi figyelembe.

Anderson [12] a kvantum elmélet alapján az időtől függő perturbáció esetét vizsgálja. Az elmélet részletes kifejtésétől eltekintünk, és egyszerű számításokon keresztül mutatjuk be a lényegét [13].

Tekintsünk egy molekuláris átmenetet a $V(t)$ perturbáció hatására, amely Δt ideig tart, utána gyorsan csillapodik. Ha a molekula a perturbáció előtt az n -edik stacionárius állapotban volt, amelyet a $\psi_n^{(0)}$ sajátfüggvénnyel jellemezhetünk, akkor a perturbáció hatására az n -edik állapotból a molekula átmegy egy másik állapotba, amely állapotot a $\psi = \sum_k a_{kn} \psi_k^{(0)}$ függvény írja le, ahol

$$a_{kn} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt \quad (k \neq n), \quad \omega_{kn} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}.$$

A perturbáció megszűnte után az a_{kn} állandó az $a_{kn}(\infty)$ értéket veszi fel, és a molekula a $\psi = \sum_{kn} a_{kn}(\infty) \psi_k^{(0)}$ függvénnyel leírt állapotban fog tartózkodni, ahol $\psi_k^{(0)}$ kielégíti a nem perturbált Schrödinger-egyenletet. Az a_{kn} együttható abszolút értékének négyzete az n kezdeti állapotból k -adik stacionárius állapotba történő átmenet W_{kn} valószínűségét jelenti:

$$W_{kn} = |a_{kn}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2. \quad (12)$$

Annak a teljes S valószínűsége, hogy a molekula az ütközés után nem lesz az n -edik állapotban,

$$S = \sum |a_{kn}|^2, \quad (k \neq n). \quad (13)$$

Az elfajult állapotok esetében ezt az összeget még közepelni kell az elfajult állapotokra, azaz ez esetben az m kvantumszám összes lehetséges, $2j+1$ számú értékére:

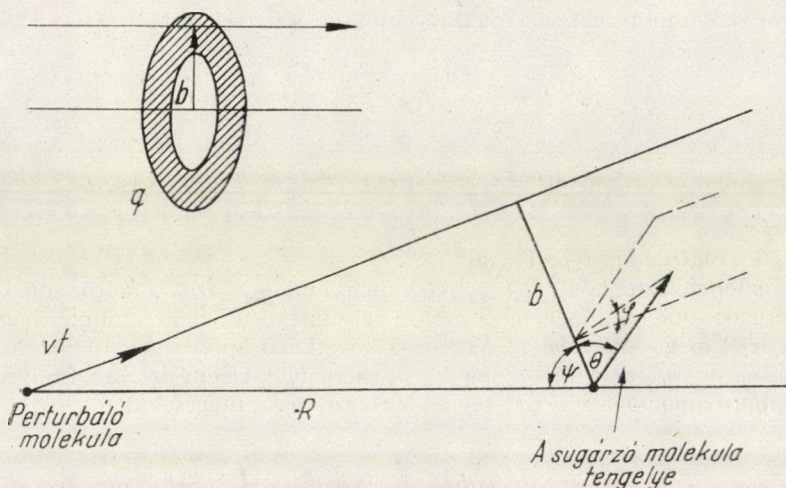
$$\bar{S} = \frac{1}{2j+1} \sum_m \sum_k |a_{kn}^m|^2. \quad (14)$$

Figyelembe véve, hogy az ütközés különböző b -értékekkel történik, az \bar{S} -t össze-

gezni kell b összes lehetséges értékeire. A q körgyűrű elemén áthaladó molekulák száma arányos $2\pi b db$ -vel (lásd a 6. ábrát). Mivel \bar{S} függ a b -től, így

$$\sigma = \int_0^{\infty} 2\pi \bar{S}(b) b db. \quad (15)$$

A σ -ra kapott kifejezés a molekulák optikai hatáskeresztmetszetét jellemzi. Ha csak erős ütközéseket vizsgálunk, amelyeknél $b \leq d$ esetén, $\bar{S}(b) = 1$, és $b > d$ esetén



6. ábra

$\bar{S}(b) = 0$, akkor $\sigma = \pi d^2$, ahol d az optikai impakt paraméter. A kapott összefüggés $\bar{S}(b)$ -n keresztül kapcsolatot ad az optikai impakt paraméter és a molekulák kölcsönhatása között. Ily módon azt mondhatjuk, hogy az optikai impakt paraméter függ a kölcsönhatás típusától. Az $\bar{S}(b)$ általában nagyon bonyolult függvény, és az adott kölcsönhatás mátrixelemeitől függ. Az optikai hatáskeresztmetszet a $\sigma(j_a)$ parciális hatáskeresztmetszetek közéértéke, megfelelően a perturbáló molekula j_a rotációs állapotának:

$$\sigma = \sum_{j_a} \varrho(j_a) \sigma(j_a), \quad (16)$$

ahol $\varrho(j_a)$ a Boltzmann-faktor, amely a j_a nivå betöltöttségi fokát jelenti, és

$$\sigma(j_a) = \int_0^{\infty} 2\pi \bar{S}(b, j_a) b db. \quad (17)$$

Anderson elmélete szerint [13] az \bar{S} -et két tag összegeként írhatjuk fel:

$$\bar{S} = \bar{S}_1 + \bar{S}_2, \quad (18)$$

ahol

$$\bar{S}_1 = i \left[\sum_{m=-j_i}^{j_i} \frac{\langle m | P^i | m \rangle}{2j_i + 1} - \sum_{m=-j_f}^{j_f} \frac{\langle m | P^f | m \rangle}{2j_f + 1} \right], \quad (19)$$

amely a vonal-eltolódást adja, és

$$\bar{S}_2(b, j_a) = \frac{1}{2} \left[\sum_{m_i, m_a} \frac{\langle j_i m_i j_a m_a | P^2 | j_i m_i j_a m_a \rangle}{(2j_i + 1)(2j_a + 1)} + \sum_{m_f m_a} \frac{\langle j_f m_f j_a m_a | P^2 | j_f m_f j_a m_a \rangle}{(2j_f + 1)(2j_a + 1)} \right] \quad (20)$$

a kiszélesedést határozza meg.

Ezek kiszámításánál a következő típusú mátrixelemeket kell meghatározni:

$$\langle \alpha | P | \beta \rangle = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{\alpha\beta} t} \langle \alpha | V(t) | \beta \rangle dt, \quad (21)$$

ahol

$$\omega_{\alpha\beta} = \frac{E(\alpha) - E(\beta)}{\hbar} = \frac{E(j_i) + E(j_a) - E(j'_i) - E(j'_a)}{\hbar},$$

és $V(t)$ a kölcsönhatási potenciál.

Anderson feltételezte, hogy $\bar{S}_2(b, j_a)$ kiszámításánál csak azok a tagok adnak lényeges hozzájárulást rotációs átmenetek esetén, amelyeknél $\omega_{\alpha\beta} = 0$. Ez a feltétel a rezonancia-esetnek felel meg. Anderson az $\bar{S}(b)$ -re a következő approximációt ajánlja: $\bar{S}(b) = \bar{S}_2(b)$, ha $b > b_0$, és $\bar{S}(b) = 1$, ha $b < b_0$, ahol b_0 kielégíti az $\bar{S}_2(b_0) = 1$ egyenletet. Ez az approximáció a $\sigma = \pi d^2$ -re a következő összefüggést adja:

$$\sigma = \int_0^{\infty} 2\pi \bar{S}(b) b db = \int_0^{S=1} 2\pi b db + \int_{S=1}^{\infty} 2\pi \bar{S}(b) b db. \quad (22)$$

Az ilyen módon számított d értékek nem egyeznek a kísérleti eredményekkel, illetve az egyezés csak a legjobban betöltött állapotokra kielégítő. A kísérleti eredményeink ugyanis azt mutatják, hogy a vonalak kiszélesedése a j rotációs kvantumszámtól is függ. Mi \bar{S} kiszámításánál figyelembe vettük az összes lehetséges ütközést, rugalmasat és rugalmatlant (inelasztikus), azaz azokat a tagokat is, amelyekre $\omega_{\alpha\beta} \neq 0$. Elméleti vizsgálataikban Van Kranendonk és Fiutak [14] is ezt az esetet vizsgálták, amikor Anderson-elméletét kiterjesztették a Raman-spektrumokra. Ők rámutattak arra, hogy a Raman-szórás intenzitását a szórási tenzor határozza meg, és az alapvető különbséget a Raman- és infravörös vonalak kiszélesedésében a szórási tenzor és az elektromos dipólus momentum transzformációs tulajdonságai közötti különbség okozza. A Raman-szórásra vonatkozó, ilyen alapon végzett számítások azt eredményezik, hogy monokromatikus gerjesztő fény esetén ütközési közelítésben a Raman-vonalak Lorentz-eloszlással bírnak, és a Raman-szórási tenzor különböző komponenseinek ($j = 0, 1, 2$) transzformációs tulajdonságai miatt különbözőképpen szélesednek ki.

$j = 1$ esetén egyébként a számítások az Anderson-féle összefüggéshez vezetnek a sugárzó dipólus esetében. Az izotróp és anizotróp Raman-szórás $j = 0$ és $j = 2$ -höz tartozik. Mint ahogyan ez Andersonnál már felmerült, a rezonancia területe nagyon fontos a kiszélesedés megértéséhez. Az ütközés időtartama, amelyet a b impakt

paraméterrel és a v relatív sebességgel fejezhetünk ki, $\Delta t \sim b/v$ nagyságrendű. A Δt értéke általában függ a trajektoria alakjától és a kölcsönhatás jellegétől, amely a kiszélesedésért felelős. A klasszikus szemlélet nézőpontjából az ilyen ütközés perturbációt okozhat, amely Δt nagyságrendű ideig tart. Ezért az ilyen ütközés az ütköző molekulák közös energiáját ΔE értékkel megváltoztathatja, amely $\hbar \cdot \Delta t^{-1}$ nagyságrendű. Az $\bar{S}(b)$ -t ennek megfelelően, a különböző ütközéseknek megfelelő tagok összegeként állíthatjuk elő [14]:

$$\bar{S}(b) = \bar{S}_{\text{el}}(b) + \bar{S}_{\text{inel}}(b) + \bar{S}'_{\text{inel}}(b) + \bar{S}''_{\text{inel}}(b). \quad (23)$$

Anderson elméletében csak az első tag szerepel. Kimutatható, hogy ebben az esetben a vonalak kiszélesedésének az elmélet szerint a j rotációs kvantumszámtól nem kell függenie. Azonkívül, az $\bar{S}(b)$ meghatározása dipólsugárzás esetében történt, de az így kapott eredmény nem egyezik meg a Raman-szórásra kapott eredménnyel. Kvadrupól-sugárzás esetében, az $\bar{S}_{\text{el}}(b)$ tartalmaz egy vegyes tagot, ún. interferenciát, ami azt jelenti, hogy a kezdeti és a végső állapotban létrejövő fáziseltolódások nem függetlenek egymástól. Dipólsugárzás esetében ez az interferencia-tag a Clebs—Gordon együtthatók [15] tulajdonsága miatt ($j=1$ az eredő momentum értéke) zérussal egyenlő. Ily módon, ha Anderson elméletével számolunk, a legjobban betöltött állapotoknak megfelelő vonalak esetében, véletlennek mondható egyezés van. Ha figyelembe vesszük az interferencia-tagot is, amelynek kiszámítása eléggé körülményes, a kísérleti eredményekkel nem összeegyeztethető értékeket kapunk, továbbá a j rotációs kvantumszámtól függőség mutatkozik, ami a kísérleti eredményeinket kvalitatíve máris alátámasztja.

Vegyük viszont figyelembe, hogy $\bar{S}(b)$ a sugárzás koherenciája megzavarásának valószínűségét jelenti a perturbáló molekula hatására, és hogy a koherencia megzavarásának két oka lehetséges:

a) a perturbáló molekula impulzusmomentum vektorának csak az iránya változik meg, vagyis csak a térbelileg elfajult állapotok között indukálódnak átmenetek (rugalmas ütközés, Debye-féle mechanizmus);

b) a különböző rotációs állapotok között indukálódnak átmenetek, vagyis a sugárzó molekula impulzusmomentumának nagysága változik meg (rugalmatlan ütközés).

Ezek figyelembevételével kvadrupólus-kvadrupólus kölcsönhatás esetén az optikai impakt paraméterek értékét a

$$d = 1,45 \left[\frac{Q_1 \cdot Q_2}{\hbar v} \right]^{1/4} \cdot [\bar{S}(j, j+2; 2)]^{1/8} \quad (24)$$

kifejezés szolgáltatja, ahol Q_1, Q_2 a sugárzó és a perturbáló molekula kvadrupólusmomentumai, v a molekulák relatív sebessége és $\bar{S}(j, j+2; 2)$ a sugárzó és perturbáló molekulák rotációs kvantumszámaitól és más molekuláris paraméterektől függ. Az $\bar{S}(j, j+2; 2)$ függvény j -től való függése a 7. ábrán látható, N_2 esetén. Az ily módon számított optikai impakt paraméterek az II. táblázatban láthatók. Hasonló módon lehet kiszámítani a diszperziós kölcsönhatásból származó impakt paramétereket is (lásd a II. táblázatot). A II. táblázatban megadtuk a kvadrupólus-kvadrupólus és diszperziós kölcsönhatások együttes figyelembevételével számított impakt paramétereket. Amint látható, a kísérleti és elméleti eredmények közötti egyezés

kielégítő, ami azt jelenti, hogy a (24) formula alapján végzett számítások az impakt-paraméter nagyságára is és annak j -től való függésére is jó eredményt adnak.

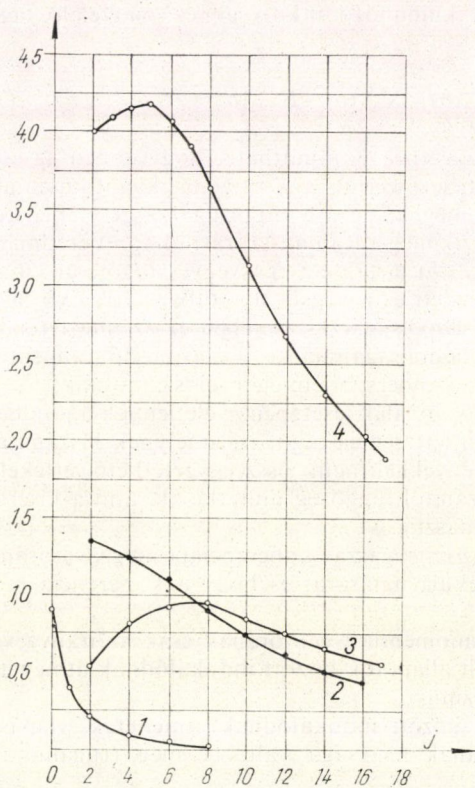
Az $\bar{S}(j, j+2; 2)$ részletes vizsgálata következőkhöz vezet: a kiszélesedés Debye-féle mechanizmusa csak alacsony j -k esetén effektív. A j növekedésével az alapvető

szerepet a különböző rotációs szintek közötti indukált átmenetek veszik át, ezen átmenetek valószínűségei azonban bizonyos j értéktől kezdve szintén csökkennek (lásd a 7. ábrát). Ez azt jelenti, hogy j növekedésével az effektív ütközések száma a $\varrho(j_a)$ Boltzmann eloszlásnak megfelelően csökken, így módon az ütközések közötti τ_0 idő megnövekszik, a $\Delta\nu \sim 1/\tau_0$ vonalkiszélesedés csökken, és hasonló módon csökken a d optikai impakt paraméter is.

A Q -ágak vizsgálata 1–10 atm nyomáson

A vibrációs spektrumok vizsgálata a molekulák felépítésére vonatkozóan ad felvilágosítást, és a vonalak kiszélesedésének természetét előidéző okokat segít megvilágítani. *Szterin* [16] kísérletileg vizsgálta a gőz és folyadék állapotú benzol $\Delta\nu = 992 \text{ cm}^{-1}$ sávját, és meghatározta a sáv alakját és szélességét. *Szobelman* [17] a megfigyelt szélességet a vibráció és rotáció kölcsönhatásával magyarázta. *Mihajlov* [18] az N_2 és O_2 vibrációs sávjait vizsgálta magas nyomáson, és azt tapasztalta, hogy ezek a sávok aszimmetrikusak, és félértékszélességük még magas nyomás hatására sem változik.

Bazsulín és Lazarev [19] alacsony nyo-



7. ábra 1— $\bar{S}_{el}(j)$; 2— $\bar{S}_{inel}(j)$; 3— $\bar{S}_{inel}''(j)$; 4— $\bar{S}(j, j+2; 2)$

máson 1–10 atm tartományban végeztek vizsgálatokat néhány dipólus nélküli molekula esetében. Kísérleti eredményeik és a számítások azt mutatták, hogy a sávok aszimmetriáját és félértékszélességét a rotáció és vibráció kölcsönhatása következtében fellépő struktúra okozza, és a $\text{CH}_4 \nu_2$ sávja esetében még a Coriolis-erő miatt fellépő forgás is szerepet játszik. A Raman vibrációs sávok vizsgálatai azt mutatják, hogy a sávok nyomás hatására nem változnak, illetve ez a változás elhanyagolhatóan kicsiny.

A vibrációs sávok a $\Delta\nu = +1$ átmenet következtében jönnek létre. A Q -ágak esetében a rotációs állapot nem változik, azaz $\Delta j = 0$. Izotróp szórás esetén $\Delta j = 0$ és $\Delta m = 0$, ahol m a mágneses kvantumszám, és anizotróp szórás esetén $\Delta j = 0$ és $\Delta m = \pm 1, \pm 2$. A lehetséges rotációs átmenetek a Q -ág R, P, S, O rotációs szárnyát alkotják, amelyeknek a $\Delta j = \pm 1, \pm 2$ és $\Delta m = \pm 1, \pm 2$ átmenetek felelnek meg.

A rotációs vonalak intenzitását a molekulák polarizációs tenzora határozza meg, és a vonalakban az intenzitás eloszlása a termikus eloszlást követi ugyanúgy, mint a tiszta rotációs vonalak esetében ($\Delta v = 0$, $\Delta j = \pm 2$). Vibrációs átmenetknél ($\Delta v = 1$, $\Delta j = 0$) a molekula inercianyomatéka megváltozik, ezért a Q -ág rotációs komponensei nem egymáson helyezkednek el, hanem kissé felszakadnak. A készülék által fel nem bontott struktúra adja a Q -ág megfigyelt félértékszélességét.

Vizsgálatainkat rácsos spektrofotométeren végeztük, és gázküvetát használtunk, tükrök nélkül. Dipólnélküli molekulák után dipólussal rendelkező molekulákat is vizsgáltunk, HCl-et és NH_3 -t. A HCl vibrációs sávjában ($\Delta v = 1$, $\Delta j = 0$) egy vonal figyelhető meg $\Delta v = 2886 \text{ cm}^{-1}$ -gyel, amely a Q -ágnak felel meg. A kapott félértékszélesség $8,6 \text{ cm}^{-1}$. Az 1–10 atm tartományban kapott eredményeink azt mutatják, hogy a hibahatáron belül a Q -ág szélessége független a nyomástól.

Az NH_3 vibrációs sávjában egy vonal található, amely a Q -ágnak felel meg ($\Delta v = 3334 \text{ cm}^{-1}$). Fotografikus módszerrel történt vizsgálatok még két sáv jelenlétét állapították meg, amelyeknek hullámszáma: $\Delta v = 934$ és $964,3 \text{ cm}^{-1}$. Ezek a sávok az ún. inverziós átmenetnek felelnek meg. A sávok kis intenzitása miatt ezeket a készülékünkön nem tudtuk regisztrálni. A megfigyelt $\Delta v = 3334 \text{ cm}^{-1}$ -es sáv nagyon éles, és félértékszélességét a vizsgált intervallumban nem lehetett meghatározni.

Mint ahogy már említettük, a Q -ág a vibráció és rotáció kölcsönhatása miatt struktúrával rendelkezik, azaz a Q -ág rotációs komponensei felhasadnak. A molekulák ismert paramétereinek, mint a B rotációs konstansnak, a vibrációs és rotációs kölcsönhatás értékének és a rotációs nívók $g_j(2j+1)$ statisztikai súlyának ismeretében a Q -ág struktúráját meg tudjuk határozni. Az elméletnek megfelelően [20] a Q -ág rotációs komponenseinek frekvenciája

$$\nu_j = \nu_0 - \alpha_j(j+1) \text{ cm}^{-1}, \quad (25)$$

ahol ν_0 a vibrációs vonal frekvenciája, j a rotációs kvantumszám.

Az egyes komponensek intenzitásának eloszlását az

$$I(j) = I_0 g_j(2j+1) \exp \left\{ -\frac{B}{kT} j(j+1) \right\} \quad (26)$$

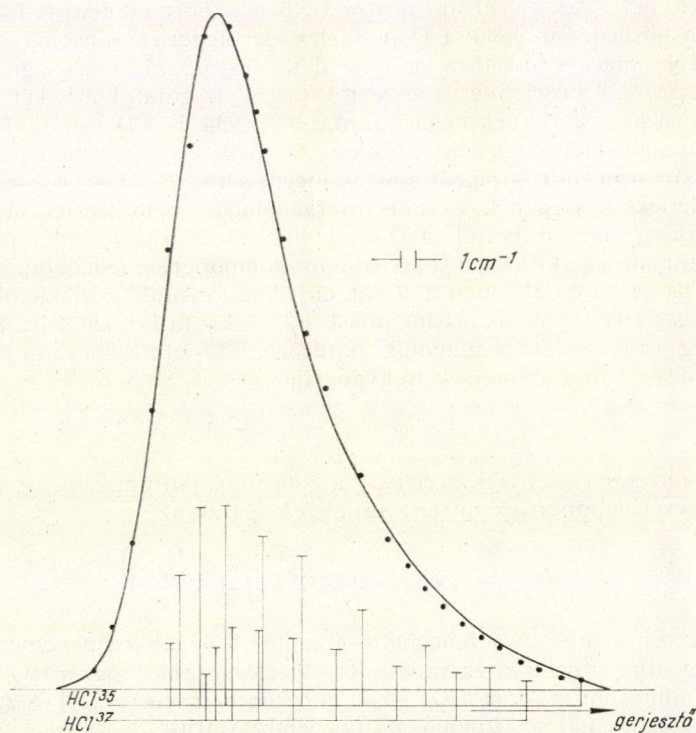
összefüggés szolgáltatja, k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet.

A Q -ág struktúrája a 8. ábrán látható. Megjegyezzük, hogy a HCl gáz a HCl^{35} és HCl^{37} izotópokból tevődik össze 75,4:24,6 koncentrációval [21]. A Q -ág struktúrájának kiszámításánál az izotópokat figyelembe vettük.

A Q -ágakat a készülék nem bontotta fel, és így a Q -ág folytonos aszimmetrikus kontúrral rendelkezik. A fel nem bontott struktúra oka lehet a Q -ág megfigyelt szélességének. Ismerve a Q -ág számított struktúráját, a megfigyelt kontúrt ki tudjuk számítani. E célból figyelembe kell venni a komponensek áthatását, diszperziós eloszlását és a készülék átviteli függvényét. Variálva a komponensek félértékszélességét, és összehasonlítva a számított kontúrt a megfigyelt kontúrral, a komponensek valódi félértékszélességét meg tudtuk becsülni, illetve meg tudtuk adni a félértékszélesség felső határát. Mint a számításainkból kitűnt, az egyes komponensek szélessége $< 0,4 \text{ cm}^{-1}$ 10 atm nyomáson. A 8. ábrán a számított (●) és a kísérletileg kapott Q -ág (folytonos) kontúrja látható HCl esetében. Ily módon a Q -ág megfigyelt kontúrját és félértékszélességét sikeresen tudtuk interpretálni, a vibráció és rotáció kölcsönhatásának figyelembevételével.

Az NH_3 esetében a Q -ág nagyon keskeny, és félértékszélességét, illetve a komponensek félértékszélességét nem sikerült meghatározni. Ez azzal kapcsolatos, hogy a vibráció és rotáció kölcsönhatási állandója valószínűleg nagyon kicsi, ezért a $\delta_Q(\text{NH}_3) \sim \frac{kT}{B} \propto$ jelentéktelen.

Ezek a kísérleti eredmények más szerzők [19] más molekulákra vonatkozólag nyert eredményeivel összeegyeztethetők. A HCl sávjának aszimmetriája és szélessége a Q -ág felhasadásának következménye, a vibráció és rotáció kölcsönhatása miatt. A komponensek valódi szélessége a vizsgált 1–10 atm intervallumban kismértékű.



8. ábra

Mi erősen polarizált sávokat vizsgáltunk. Felvetődik a kérdés, hogy milyen effektusokat figyelhetünk meg depolarizált sávok és rotációs-vibrációs sávok ($\Delta v=1, \Delta j=2$) esetében. A kísérleti eredmények azt mutatják mindkét esetben, hogy a rotációs komponensek még jobban kiszélesednek. Ez azt jelenti, hogy a kiszélesedés ütközések esetén a rotációs mozgás perturbációjával kapcsolatos, pl. a molekulák irány szerinti átrendeződésével és a rotációs állapotok megváltozásával.

A rotációs-vibrációs sávok O_2 esetében a $\Delta v=1, \Delta j=\pm 2$, CH_4 esetében a $\Delta v=1, \Delta j=0, \Delta m=\pm 1, \pm 2$ átmenetnek felelnek meg. A kísérleti adatok alapján a kiszélesedés mechanizmusát a következő módon képzelhetjük el: ha átmenet esetén

az impulzusmomentum nagysága vagy iránya megváltozik (anizotróp Q -ág), a komponensek szélességére befolyással lesz a molekula forgó mozgása, és az impulzusmomentum irányának térbeli megváltozása megzavarja a sugárzás koherenciáját, ami a komponensek kiszélesedéséhez vezet. Ez abban tükröződik, hogy az α_{ik} [22] polarizációs tenzor $\Delta j=0$, $\Delta m=\pm 1, \pm 2$ átmenet esetén anizotróp, és a szórt sugárzás a molekula forgása által modulálódik, és ily módon a kiszélesedés a sáv polarizáció fokától függeni fog.

Az infravörös tartományban kapott kísérleti eredmények ezt az elképzelést alátámasztják. A CH_4 molekula Q és R -ágai He, Ar és N_2 molekulák hatására különböző mértékben szélesednek ki, és az R -ág kiszélesedése a Q -ág kiszélesedését felülmúlja. Ar hatására a CH_4 R -ága rotációs komponenseinél a j rotációs kvantumszámtól való gyenge függés is megfigyelhető. Mivel a Q és R ágak különböző módon szélesednek ki, ez arra mutat, hogy a kiszélesedés mechanizmusa is különböző más és más molekulák hatására, és ezért nehéz lenne a kiszélesedés mechanizmusát megadni.

Az izotróp Q -ágot a $\Delta v=1$, $\Delta j=0$, $\Delta m=0$ átmenet hozza létre. Eme átmenetnél sem az impulzusmomentum nagysága, sem iránya nem változik meg, ezért a polarizálhatósági tenzor teljesen izotróp, és a komponensek szélessége független a molekula forgó mozgásától, mivel a forgó mozgás nem modulálja a szórt sugárzást, és nem zavarja meg a sugárzás koherenciáját. Az ütközési kiszélesedés hiánya ilyen átmenetek esetén arra mutat, hogy a molekulák rotációs állapotai nem perturbálódnak ütközések hatására, és a Q -ágak megfigyelt szélessége a vibráció és rotáció kölcsönhatásának tulajdonítható.

A jelen dolgozat alapját a szerzőnek a Moszkvai Állami Egyetem Fizikai Kara Optikai Tanszékén az időközben elhunyt *P. A. Bazulin* professzor vezetése mellett elért eredményei szolgáltatták.

Ezúton is köszönetemet fejezem ki *Budó Ágoston* akadémikusnak és *Ketskemény István* professzornak a kézirat átnézéséért és értékes tanácsaikért.

IRODALOM

- [1] *Smekal A.*, Naturwissenschaften, 873, 1923.
- [2] *Raman C. V.*, Indian J. Phys., 2, 387, 1928.
- [3] *Landsberg G.*, *Mandelstam L.*, Naturwissenschaften, 16, 557, 772, 1928.
- [4] *Placzek G.*, Z. Phys. 70, 84, 1931.
- [5] *Welsh H. L.*, *Cumming C.*, *Stansbury E. J.*, J. Opt. Soc. Amer. 41, 712, 1951.
Stoicheff B. P., Canad. J. Phys., 32, 330, 1954.
Welsh H. L., *Stansbury E. J.*, *Romanko J.*, *Feldman T.*, J. Opt. Soc. Amer., 45, 338, 1955.
Ю. А. Лазарев, Канд. дисс. Москва, 1963.
- [6] *Stoicheff B. P.*, Canad. J. Phys., 32, 330, 1954.
Shull E. R., J. Opt. Soc. Amer., 45, 670, 1955.
- [7] *Н. О. Чечин*, *С. М. Файнштейн* и *Т. М. Лифшиц*. Электронные умножители Москва 1957.
- [8] *Г. С. Ландсберг*, *П. А. Бажулин*, *М. М. Сушинский*. Основные параметры спектров комбинационного рассеяния. Изв. АН. СССР. Москва, 1956.
С. Г. Раутина. УФН. 66, 475, 1958.
- [9] *М. М. Сушинский*. Докторская диссертация. ФИАН. СССР. 1958.
- [10] *М. Борн*. Оптика. Гос. Н.-тех. изд. Укр. Харьков—Киев.
Т. Чен, *М. Такео*, УФН. 66, 391, 1958.
Ч. Таунс, *А. Шавлов*. Радиоспектроскопия. гл. 13, И. Л. Москва, 1959.
- [11] *В. Вайскопф*, УФН. 13, 552, 1933.
- [12] *P. W. Anderson*, Phys. Rev. 76, 647, 1949.
- [13] *Л. Ландау* и *Е. Лифшиц*. Квантовая механика. ГИТТЛ, 1948.
- [14] *J. Fiutak*, *J. Van Kranendonk*, Canad. J. Phys., 40, 1085, 1962. 41, 21, 1963.
J. Van Kranendonk, Canad. J. Phys. 41, 433, 1963.
- [15] *Е. Кондон* и *Г. Шортли*. Теория атомных спектров. М., Изд. иностр. лит. 949.
- [16] *Х. Е. Стерин*, Изв. АН. СССР. сер. физ. 14, 411, 1950. Труды ФИАН СССР, т IX. 1958.
- [17] *И. И. Собельман*. Изв. АН СССР. сер. физ. 17, 554, 1953. Труды ФИАН. СССР. т. IX. 1958.
- [18] *Г. В. Михайлов*. ЖЭТФ. 36, 1369, 1959. 37, 1570, 1959.
- [19] *П. А. Бажулин*, *Ю. А. Лазарев*, Опт. и спектр. 8, 206, 1960.
- [20] *G. Herzberg*, Molekula-szinképek és molekula-szerkezet. I. Akadémiai Kiadó. Budapest, 1956.
- [21] *Дж. Кэй*, *Т. Леби*, Таблицы физических и химических постоянных. Москва, 1962.
- [22] *Г. Плачек*, Релеевское рассеяние и Раман-эффект. Гостехиздат, 1935.
- [23] *Ф. Пинтер*, Опт. и Спектр. 17, 792, 1964.
- [24] *Ф. Пинтер*, Кандидатская диссертация. Москва, 1964.
- [25] *П. А. Бажулин*, *Ф. Пинтер*, Опт. и Спектр. (megjelenés alatt)
- [26] *Ф. Пинтер*, Вестник МГУ. (megjelenés alatt)

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A HEISENBERG—BORN—JORDAN-FÉLE KVANTUMMECHANIKA VISZONYA AZ ENYÉMHEZ*

ERWIN SCHRÖDINGER

1. §. Bevezetés és tartalmi áttekintés

Tekintetbe véve egyrésről a Heisenberg-féle kvantummechanika¹, másrésről az alapvonásaiban általam kifejtett, „hullámmechaniká”-nak vagy „fizikai mechaniká”-nak nevezett elmélet² kiindulópontja és az alapul vett elgondolások rendkívül eltérő jellegét, igen különös, hogy ez a két új kvantumelmélet, ami az eddig ismeretessé vált speciális eredményeket illeti, *egymással* ott is megegyezik, ahol a régi kvantumelmélettől eltérést mutatnak. Mindenek előtt az oszcillátor és a rotátor esetében fellépő „felesszámúságot” említem itt meg. Ez valóban igen figyelemre méltó, hiszen a kiindulópont, az elgondolások, a módszer, az egész matematikai apparátus alapvetően különbözőknek látszanak. Mindenek előtt azonban úgy látszik, mintha az eltérés a klasszikus mechanikától a két elméletben éppen homlokegyenest ellentétes irányban következnek be. Heisenbergnél a folytonos klasszikus változók helyét diszkrét számértékekből álló rendszerek (mátrixok) foglalják el; ezek a számértékek egészszámú indexpártól függnék és meghatározásukra *algebrai* egyenletek szolgálnak. Maguk a szerzők elméletüket „igazi diszkontinuum-elmélet”-nek nevezik.³ A hullámmechanika ezzel szemben, éppen ellenkezőleg, a klasszikus mechanikától a *kontinuum-elmélet felé* tett lépést jelent. Hiszen a véges számú függő változón keresztül leírható történés helyére folytonos *térjellegű* történés lép a konfigurációs térben, melyet egyetlen, hatáselvből leszármaztatható *parciális* differenciálegyenlet határoz meg. Ez a hatáselv, ill. ez a differenciálegyenlet helyettesíti a régebbi „klasszikus kvantumelmélet” mozgásegyenleteit és kvantumfeltételeit.⁴

A következőkben szeretném feltárni a Heisenberg-féle kvantummechanika és az én hullámmechanikám igen intim *benső kapcsolatát*. Formális matematikai szem-

* Ann. d. Phys. 79, 734, 1926.

¹ W. Heisenberg, Ztschr. f. Phys. 33, 879, 1925 (Magyar Fizikai Folyóirat 13, 447, 1965); M. Born és P. Jordan, uo. 34, 858, 1925 (Magyar Fizikai Folyóirat 13, 529, 1965); M. Born, W. Heisenberg és P. Jordan uo. 35, 557, 1926 (Magyar Fizikai Folyóirat 14, 35, 1966). A következőkben a rövidség kedvéért a három szerző nevét általában Heisenbergével helyettesítem s a két utóbb említett dolgozatra a *Kvantummechanika I.*, ill. *II.* címmel hivatkozom. Érdekes hozzájárulások még az elmélethez: P. Dirac, Proc. Roy. Soc. London 109, 642, 1925 (Magyar Fizikai Folyóirat 14, 171, 1966) és uo. 110, 561, 1926.

² E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 361; 79, 489, 1926.

³ Kvantummechanika I. 879. o.

⁴ Elméletem kidolgozására az ösztönzést L. de Broglie disszertációja (Thèses, Paris 1924), Ann. de Physique (10) 3, 22, 1925, és A. Einstein rövid, de végtelenül messzire tekintő megjegyzései, Berl. Ber. 1925, 9. oldaltól, adták. Nem tudok arról, hogy elméletem Heisenbergével bármiféle genetikus kapcsolatban állna. Elméletéről természetesen tudomásom volt, az azonban a transzcendens algebra igen nehézkesnek látszó módszerei és a szemléletesség hiánya folytán elriasztó, hogy azt ne mondjam: visszataszító hatást tett rám.

pontból tekintve ez a kapcsolat egyenesen mint *azonosság* (ti. a két elméleté) jellemezhető. A bizonyítás gondolatmenete a következő.

Heisenberg elmélete valamely kvantummechanikai probléma megoldását végtelen sok algebrai egyenlet rendszerének megoldására vezeti vissza, melynek ismeretlenei — végtelen mátrixok — a mechanikai rendszer klasszikus hely- és impulzuskoordinátáinak, valamint ezek függvényeinek felelnek meg és sajátos *számítási törvényeket* követnek. (A megfeleltetés olyan, hogy *egy* hely-, *egy* impulzuskoordinátának vagy ezek *egy* függvényének mindenkor *egy-egy* végtelen mátrix felel meg.)

Mindenek előtt meg fogom mutatni (2. és 3. §§), miként rendelhetünk a hely- és az impulzuskoordináták bármely függvényéhez egy-egy mátrixot oly módon, hogy ezek a mátrixok a Born—Heisenberg-féle formális számítási szabályoknak (ezek közé számítom az ún. „kvantumfeltételt” vagy „felcserélési szabályt” is; lásd alább) *minden esetben eleget tegyenek*. A mátrixok ezen hozzárendelése a függvényekhez *általános jellegű*, nincs semmilyen vonatkozásban az éppen vizsgált *speciális* mechanikai rendszerrel, hanem minden mechanikai rendszerre ugyanolyan. (Más szavakkal: a hozzárendelés törvényében a speciális Hamilton-függvénynek még nincs szerepe.) Másrészről azonban a hozzárendelés még nagymértékben *meghatározatlan*. Az ugyanis *tetszőleges* teljes ortogonális függvényrendszer *közvetítésével* történik; e rendszer függvényeinek értelmezési tartománya az *egész konfigurációs tér*. (NB. *nem* a „*pq*-tér”, hanem a „*q*”-tér.) A hozzárendelés egyelőre fennálló *meghatározatlansága* éppen abban áll, hogy a közvetítő szerepet *tetszőleges* ortogonális rendszer betöltheti.

Miután így igen általános módon megszerkesztettük a mátrixokat, melyek az általános számítási szabályoknak eleget tesznek, a 4. §-ban a következőket fogom megmutatni: azon *speciális*, az adott *speciális* problémát jellemző algebrai egyenletrendszernek, mely a hely- és az impulzuskoordináták *mátrixait* a Hamilton-függvény *mátrixával* kapcsolatba hozza és amelyet a szerzők „mozgásegyenletek”-nek neveznek, megoldását hiánytalanul megkapjuk oly módon, hogy a közvetítő szerepet egy *meghatározott* ortogonális rendszerre ruházzuk, nevezetesen azon parciális differenciálegyenlet *sajátfüggvényeinek* rendszerére, amely hullámmechanikám alapját képezi. Ezen differenciálegyenlet természetes *peremértékfeladatának* megoldása *teljesen ekvivalens* a Heisenberg-féle algebrai probléma megoldásával. *Valamennyi* Heisenberg-féle mátrixelem, mely bennünket — azon várakozásunk alapján, miszerint azok meghatározzák az „átmeneti valószínűségeket” vagy „vonaltintenzitásokat” — érdekelhet, valóban kiszámítható *differenciálások* és *kvadraturák* útján, mielőtt a *peremértékfeladatot* megoldottuk. Egyébként ezek a mátrixelemek, ill. bizonyos mennyiségek, melyek azokkal szoros kapcsolatban állnak, a hullámmechanikában tökéletesen szemléletes jelentést nyernek: azok az atom elektromos momentuma parciális rezgéseinek amplitúdóit adják meg. A kibocsátott fény intenzitása és polarizációja tehát a *Maxwell—Lorentz-elmélet talaján állva* megérthető. Ezen összefüggés rövid előzetes vázlata megtalálható az 5. §-ban.

2. §. Operátorok és mátrixok hozzárendelése a rendezett függvénytáblákhoz és a szorzási szabály igazolása

A mátrixok megszerkesztésénél a *punctum saliens*-t azon egyszerű megjegyzés képezi, hogy a kétszer n számú $q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n$ mennyiség (hely- és kanonikusan konjugált impulzuskordináták) függvényeire vonatkozó sajátos Heisenberg-féle számítási szabályok pontosan megegyeznek az egyszer n számú q_1, q_2, \dots, q_n változó függvényeire ható lineáris differenciáloperátorokra a megszokott analízis értelmében érvényes szabályokkal. A megfeleltetést itt oly módon kell létesítenünk, hogy $q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n$ adott függvényében minden egyes p_l -et a megfelelő $\partial/\partial q_l$ operátorral helyettesítjük. — A $\partial/\partial q_l$ operátor $\partial/\partial q_m$ -mel valóban tetszőleges m -re felcserélhető, ezzel szemben q_m -mel csak akkor, ha $m \neq l$. Az $m = l$ esetén felcserélés és kivonás útján nyert

$$\frac{\partial}{\partial q_l} q_l - q_l \frac{\partial}{\partial q_l} \quad (1)$$

operátor, ha azt a q_k -k tetszőleges függvényére alkalmazzuk, reprodukálja a függvényt; ez az operátor tehát az azonosság. Ezen egyszerű tény a mátrixok körében majd mint a Heisenberg-féle felcserélési szabály tükröződik vissza.

E tájékoztató jellegű előzetes megjegyzés után térjünk rá a szisztematikus tárgyalásra. A $\partial/\partial q_l$ -ek és a q_m -ek említett „nem mindig felcserélhető” jellege folytán a q_k -k és p_k -k valamely „megszokott értelemben vett függvény”-ének nem feleltethető meg egyértelműen egy meghatározott operátor; operátort csak „meghatározott módon felírt függvénytáblához” rendelhetünk. Ezen kívül, minthogy a $\partial/\partial q_k$ operátorokkal más műveletet mint összeadást és szorzást nem tudunk végezni, a q_k -k és p_k -k adott függvényének legalább a p_k -kban reguláris hatványsor alakjában kell felírva lennie, hogy a p_l -ek helyettesítését a $\partial/\partial q_l$ -ekkel elvégezhessük. Elegendő, ha megfontolásainkat az ilyen hatványsorok egyetlen tagja, azaz egy

$$F(q_k, p_k) = f(q_1, \dots, q_n) p_r p_s p_t g(q_1, \dots, q_n) p_r h(q_1, \dots, q_n) p_r p_s \dots \quad (2)$$

szerkezetű függvény esetére végezzük el. Az ilyet „rendezett függvénytáblához”-nak fogjuk nevezni és a következő szerkezetű operátort rendeljük hozzá:

$$\left. \begin{aligned} [F, \cdot] &= f(q_1, \dots, q_n) K^3 \frac{\partial^3}{\partial q_r \partial q_s \partial q_t} \\ g(q_1, \dots, q_n) K \frac{\partial}{\partial q_r} h(q_1, \dots, q_n) K^2 \frac{\partial^2}{\partial q_r \partial q_s} \dots; \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

itt — valamivel általánosabban, mint tájékoztató jellegű előzetes megjegyzésünkben — nem egyszerűen $\partial/\partial q_r$ -rel helyettesítettük p_r -et, hanem $K\partial/\partial q_r$ -rel, ahol K univerzális állandót jelentsen. Az F rendezett függvényből származtatott operátor rövid jelölésére átmenetileg (azaz csak a jelen bizonyítás céljára) bevezetem az $[F, \cdot]$ szimbólumot. Az $[F, u]$ szimbólummal a q_1, \dots, q_n változóknak azt a (megszokott értelemben vett) függvényét fogom jelölni, amelyet úgy kapunk, hogy az operátort az $u(q_1, \dots, q_n)$ (megszokott értelemben vett) függvényre alkalmazzuk. Ha G egy másik rendezett függvény, úgy $[GF, u]$ azt a függvényt jelöli, mely u -ból úgy adódik, hogy először az F -hez, azután a G -hez rendelt operátort alkalmazzuk,

ami a definíció szerint ugyanazt jelenti, mint GF operátorának alkalmazása. Természetesen ez általában nem egyenlő $[FG, u]$ -val.

Rendeljünk most minden F -hez hasonló rendezett függvényhez a neki (3) szerint megfeleltetett operátor, valamint egy az egész q -téren mint értelmezési tartományon értelmezett tetszőleges teljes ortogonális rendszer közvetítésével egy-egy *mátrixot*, mégpedig a következőképpen. A változók q_1, q_2, \dots, q_n sorozata helyett rövidítésként egyszerűen x -et írunk, amint az az integrálegyenletek elméletében szokásos; $\int dx$ az egész q -térré kiterjesztett integrált jelent. Alkossanak mármost az

$$u_1(x)\sqrt{\varrho(x)}, \quad u_2(x)\sqrt{\varrho(x)}, \quad u_3(x)\sqrt{\varrho(x)}, \dots \text{ in inf.} \quad (4)$$

függvények teljes, egyre normált ortogonális rendszert. Eszerint

$$\left. \begin{aligned} \int \varrho(x) u_i(x) u_k(x) dx &= 0, & \text{ha } i \neq k, \\ &= 1, & \text{ha } i = k. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Feltesszük továbbá, hogy ezek a függvények a q -tér természetes *peremén* (általában a végtelenben) elég gyorsan eltűnnek, úgyhogy bizonyos később elvégzendő parciális integrálásoknál a mellékesen fellépő peremintegrálok zérusnak adódnak.

A (2) alakú F függvényhez, melynek a (3) operátor felel meg, rendeljük hozzá most a következő *mátrixot*:

$$F^{kl} = \int \varrho(x) u_k(x) [F, u_l(x)] dx. \quad (6)$$

(Az indexek írásmódja a bal oldalon ne ébressze bennünk a „kontravariáns” mellékgondolatot; ebből a szempontból tekintve, melyet itt mellőzni kívánunk, inkább egy indexet kellene fent elhelyeznünk, a másikat pedig lent; a mátrixindexeket azért helyeztük *fent*, mert később fel kell majd írunk a maguknak a q_k -knak és a p_k -knak megfelelő mátrixelemeket is és itt az alsó indexek helye foglalt.) — Szavakban: valamely mátrixelemet oly módon számítunk ki, hogy az ortogonális rendszernek a *sorindexszel* jellemzett függvényét (az ortogonális rendszer függvényein mindenkor az u_i -kat, nem pedig az $u_i\sqrt{\varrho}$ -kat értjük) a ϱ „súlyfüggvénnyel”, valamint az *oszlopindexszel* megjelölt ortogonális függvényből az operátor alkalmazása útján nyert függvénnyel *megszorozzuk* és az értelmezési tartományra *integráljuk*.⁵

Nem nehéz megmutatni, hogy ha a rendezett függvényekre, ill. az azokhoz tartozó operátorokra az összeadás és a szorzás műveletét alkalmazzuk, úgy ez a megfelelő mátrixokon a mátrixösszeadás, ill. a mátrixszorzás elvégzését eredményezi. Az összeadás esetében ez triviális. A szorzás esetében a bizonyítás menete a következő. Legyen G valamely másik, az F -hez hasonlóan rendezett függvény és legyen

$$G^{lm} = \int \varrho(x) u_l(x) [G, u_m(x)] dx \quad (7)$$

a hozzárendelt mátrix. Képezzük az $(FG)^{km} = \sum_l F^{kl} G^{lm}$ szorzatmátrixot. Mielőtt ezt felíránk, az F^{kl} -et előállító (6) kifejezést a következőképpen alakítjuk át. A parciális integrálások sorozatával az $[F, \cdot]$ operátort az $u_l(x)$ függvényről „áthárítjuk”

⁵ Rövidebben: F^{kl} az u_l -re alkalmazott operátor k -adik „kifejtési együtthatója”.

a $\varrho(x)u_k(x)$ függvényre. Az „áthárítás” kifejezés használatával (ahelyett, hogy mondjuk „áthelyezést” mondanék) azt kívánom jelezni, hogy eközben az operációk sorrendje éppen ellentétesre változik. A „mellékesen” fellépő permintegrálokról felteesszük, hogy eltűnnek (lásd fent). Az „áthárított” operátort, a páratlan számú differenciálás esetén bekövetkező előjelváltozást is beleértve, jelöljük az $[\bar{F},.]$ szimbólummal. A (3) példa esetében

$$[\bar{F},.] = (-1)^\tau \dots K^2 \frac{\partial^2}{\partial q_{s'} \partial q_{r'}} h(q_1, \dots, q_n) K \frac{\partial}{\partial q_{r'}} \left\{ \begin{array}{l} \\ g(q_1, \dots, q_n) K^3 \frac{\partial^3}{\partial q_1 \partial q_s \partial q_r} f(q_1, \dots, q_n) \end{array} \right\} \quad (3')$$

(τ a differenciálások száma). E szimbólum felhasználásával nyerjük:

$$F^{kl} = \int u_l(x) [\bar{F}, \varrho(x)u_k(x)] dx. \quad (6')$$

Képezve a szorzatmátrixot kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_l F^{kl} G^{lm} &= \\ &= \sum_l \left\{ \int u_l(x) [\bar{F}, \varrho(x)u_k(x)] dx \cdot \int \varrho(x)u_l(x) [G, u_m(x)] dx \right\} = \\ &= \int [\bar{F}, \varrho(x)u_k(x)] [G, u_m(x)] dx. \end{aligned} \quad (8)$$

A legutóbbi egyenlőség nem más mint az ortogonális rendszerünkre vonatkozó ún. „teljességi reláció”,⁶ melyet a

$$[G, u_m(x)] \quad \text{és} \quad \frac{1}{\varrho(x)} [\bar{F}, \varrho(x)u_k(x)]$$

függvények „kifejtési együtthatóira” alkalmaztunk.

Most újabb parciális integrálásokkal hárítsuk át ismét az $[\bar{F},.]$ operátort a $\varrho(x)u_k(x)$ függvényről a $[G, u_m(x)]$ függvényre: ekkor az operátor visszanyeri eredeti alakját. Az eredmény nyilvánvalóan

$$(FG)^{km} = \sum_l F^{kl} G^{lm} = \int \varrho(x)u_k(x) [FG, u_m(x)] dx. \quad (9)$$

A bal oldalon a szorzatmátrix km indexű eleme áll, a jobb oldalon pedig, a (6) hozzárendelésnek megfelelően, az FG rendezett szorzatnak megfeleltetett mátrix km indexű eleme. Q. e. d.

3. § A Heisenberg-féle kvantumfeltétel és a parciális differenciálás szabályai

Mint hogy az (1) operáció az azonosság, a

$$p_l q_l - q_l p_l \quad (10)$$

rendezett függvénynek, amelybe — mint tudjuk — még beleolvastottuk a K univerzális állandót, a fent bevezetett hozzárendelési törvény értelmében megfeleltetett

⁶ Lásd pl. Courant—Hilbert, Methoden der mathematischen Physik I. 36. old. Fontos szem előtt tartani, hogy a teljességi összefüggés a „kifejtési együtthatókra” minden esetben érvényes, még akkor is, ha a sorfejtések maguk nem konvergálnak. Amennyiben konvergálnak, úgy a (8) egyenlőség közvetlenül nyilvánvaló.

operátor: a szorzás K -val. A (10) függvénynek tehát a következő mátrix felel meg:

$$\begin{aligned}(p_l q_l - q_l p_l)^{ik} &= K \int \varrho(x) u_i(x) u_k(x) dx = 0, \quad \text{ha } i \neq k, \\ &= K, \quad \text{ha } i = k.\end{aligned}\quad (11)$$

Ha

$$K = \frac{h}{2\pi\sqrt{-1}}, \quad (12)$$

ez a Heisenberg-féle „kvantumreláció”; a következőkben a (12) értékhez ragaszkodunk. — Magától értetődik, hogy a (11) összefüggést a q_l és p_l függvényekhez rendelt

$$\left. \begin{aligned} q_l^{ik} &= \int q_l \varrho(x) u_i(x) u_k(x) dx, \\ p_l^{ik} &= K \int \varrho(x) u_i(x) \frac{\partial u_k(x)}{\partial q_l} dx \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

mátrixok különböző sorrendben képezett szorzatainak kivonásával is megkaphattuk volna.

Térjünk most rá a „parciális differenciálás szabályaira”. Valamely (2)-höz hasonló rendezett függvény parciális differenciálása q_l szerint jelentse a következőt:⁷ a függvényt a tényezők sorrendjének megváltoztatása nélkül minden egyes helyen, ahol csak q_l fellép, differenciálni kell q_l szerint és mindezeket az eredményeket össze kell adni. Ekkor könnyű megmutatni, hogy fennáll a következő operátoregyenlet:

$$\left[\frac{\partial F}{\partial q_l}, \cdot \right] = \frac{1}{K} [p_l F - F p_l, \cdot]. \quad (14)$$

A gondolatmenet a következő. Ahelyett, hogy valóban differenciálnék q_l szerint, kényelmesebben is eljárhatok, egyszerűen p_l -et írva az egész kifejezés elé, hiszen ha áttérünk az operátorokra, ennek helyét $K \frac{\partial}{\partial q_l}$ foglalja el. Ezek után egyrésztől

K -val kell osztanom. Másrésztől azonban a $\frac{\partial}{\partial q_l}$ operátor, miután a teljes operátort valamely u függvényre alkalmaztuk, nem csupán az F -ben foglalt q_l -ekre hat majd (amit meg kell tennie), hanem helytelenül a teljes operátor hatásának kitett u függvényre is. *Éppen ezt a hibát korrigálom az $[F p_l, \cdot]$ operáció levonásával!*

Vegyük most szemügyre a parciális differenciálást valamely p_l szerint. Ennek jelentése valamely (2)-höz hasonló rendezett függvény esetében még egyszerűbb valamivel, mint a $\partial/\partial q_l$ differenciálása, hiszen a p_k -k csak hatványszorzatok alakjában lépnek fel. Gondolatban p_l minden hatványát egyes tényezőkre bontjuk fel, pl. p_l^3 helyett $p_l p_l p_l$ -et írunk; ekkor mondhatjuk: ha p_l szerint parciális differenciálást végzünk, úgy minden egyes p_l -et, mely F -ben fellép, egy-egy esetben el kell hagynunk

⁷ Mindezekkel a definíciókkal természetesen híven követjük Heisenberget. Szigorú logikai nézőpontból tekintve az alább következő bizonyítás tulajdonképpen fölösleges, és a (14), (15) szabályokat közvetlenül felírhatnánk, minthogy azok Heisenbergnél bizonyítást nyertek és csak az összeg- és szorzatszabályon, valamint a (11) felcserélési összefüggésen alapulnak, melyeket bebizonyítottunk.

(miközben az összes többi p_i érintetlen marad); valamennyi így kapott eredményt össze kell adnunk. A (3) operátor esetében eszerint így kell eljárunk: „Minden egyes $K \frac{\partial}{\partial q_i}$ -et egy-egy esetben el kell hagynunk és az összes így kapott eredményt össze kell adnunk.”

E megfontolás után azt állítom, hogy fennáll a

$$\left[\frac{\partial F}{\partial p_i}, \cdot \right] = \frac{1}{K} [Fq_i - q_i F, \cdot] \quad (15)$$

operátoregyenlet. Valóban: gondolatban képezem az $[Fq_i, \cdot]$ operátort és megkísérlem ebben az operátorban „ q_i -et F -en jobbról balra keresztülhúzni”; azaz: egymás után elvégzett felcserélésekkel a $[q_i F, \cdot]$ operátort kívánom megkapni. A „keresztülhúzás” csak olyankor ütközik akadályba, valahányszor egy $\partial/\partial q_i$ -be ütközöm. Ezzel q_i -et nem lehet egyszerűen felcserélni, hanem ezt a $\partial/\partial q_i$ -et az operátor „belsejében”

$$1 + q_i \frac{\partial}{\partial q_i} \quad (16)$$

-lel kell helyettesítenem. A felcserélések melléktermékeiként fellépő ezen egyesek, amint azt könnyű felismerni, éppen a kívánt „parciális differenciálhányadost” szolgáltatják. A keresztülhúzás elvégzése után fennmarad még a $[q_i F, \cdot]$ operátor, mely felesleges volna; ezért ezt (15)-ben explicite levonjuk. Ezzel (15)-öt is igazoltuk. Az operátorokra igazolt (14) és (15) egyenletek természetesen változatlan alakban érvényesek a bal és a jobb oldalnak megfelelő mátrixok között, minthogy a (6) képlet szerint valamely lineáris operátorhoz egy és csak egy mátrix tartozik (természetesen kezdettől fogva megválasztott, rögzített $u_i(x)$ függvényrendszer mellett).⁸

⁸ Mellesleg megjegyezzük, hogy e tétel megfordítása is fennáll, legalább is *abban* az értelemben, hogy adott ortogonális rendszer és sűrűségfüggvény mellett valamely adott mátrixhoz bizonyosan nem tartozhat több mint egy lineáris differenciáloperátor a (6) hozzárendelési szabályunknak megfelelően. Legyenek ugyanis (6) alatt az F^{kl} -ek adottak, legyen $[F, \cdot]$ a keresett lineáris operátor, melynek létezését feltételezzük, és legyen $\varphi(x)$ a q_1, q_2, \dots, q_n változók szakaszonként folytonos és szükség esetén elég sokszor differenciálható, egyébként azonban teljesen tetszőleges függvénye. Ekkor a teljességi összefüggés, ha azt a $\varphi(x)$ és $[F, u_k(x)]$ függvényekre alkalmazzuk, a következőt adja:

$$\int \varrho(x) \varphi(x) [F, u_k(x)] dx = \sum_i \left\{ \int \varrho(x) \varphi(x) u_i(x) dx \cdot \int \varrho(x) u_i(x) [F, u_k(x)] dx \right\}.$$

A jobb oldal egyértelműen ismertnek tekinthető; abban csak $\varphi(x)$ kifejtési együttható és az előre megadott F^{lk} mátrixelemek lépnek fel. „Áthárítással” (vö. a fentiekkel) a bal oldal átalakítható az

$$[F, \varrho(x) \varphi(x)]$$

$$\varrho(x)$$

függvény k -adik kifejtési együtthatójává. E függvény összes kifejtési együtthatóit egyértelműen rögzítettük tehát, amivel maga a függvény is egyértelműen meg van határozva („Courant—Hilbert”, 37. old.). Minthogy pedig $\varrho(x)$ egyszer s mindenkorra adott, és $\varphi(x)$ teljesen tetszőleges függvény, mondhatjuk: az áthárított operátornak tetszőleges függvényre — mely utóbbitól csak azt kívánjuk, hogy az operátort egyáltalán alkalmazni lehessen rá — kifejtett hatását az F^{kl} mátrix egyértelműen meghatározva; az „operátor” fogalma ugyanis logikailag azonos az alkalmazása útján nyert eredmények összességével. — Az áthárított operátorból áthárítással a keresett adódik, egyértelműen.

Figyeljünk fel arra, hogy a szereplő függvények sorbafejthetőségét nem kellett feltételeznünk. — Azt, hogy tetszőleges mátrixhoz mindenkor létezik egy lineáris operátor, nem bizonyítottuk be.

4. §. A Heisenberg-féle mozgásegyenletek megoldása

Az előzőekben megmutattuk, hogy a (4) tetszőleges teljes ortogonális rendszer segítségével a (3) és (6) definícióknak megfelelően, rendezett függvényekből képezett mátrixok eleget tesznek valamennyi Heisenberg-féle számítási szabálynak, a (11) felcserélési törvényt is ideértve. Most vegyünk szemügyre valamely speciális mechanikai problémát, melyet az adott

$$H(q_k, p_k) \quad (17)$$

Hamilton-függvény jellemez. A kvantummechanika szerzői ezt a függvényt először a *közönséges* mechanikából veszik át, melytől természetesen *nem* rendezett alakban szolgáltatja, hiszen a közönséges analízisben a tényezők sorrendje lényegtelen. A szerzők ez után meghatározott módon „normalizálják” vagy „szimmetrizálják” a függvényt a kvantummechanika céljaira, amennyiben pl. a közönséges mechanika $q_k p_k^2$ függvényét az

$$\frac{1}{2} (p_k^2 q_k + q_k p_k^2)$$

vagy a

$$p_k q_k p_k$$

vagy akár az

$$\frac{1}{3} (p_k^2 q_k + p_k q_k p_k + q_k p_k^2)$$

kifejezéssel helyettesítik; mindezek (11) szerint egymással megegyeznek. A függvény ez után „rendezett”-nek minősül, azon a tényezők sorrendjét a továbbiakban érintetlenül kell hagynunk. A szimmetrizálás általános szabályát⁹ itt nem kívánom részletezni; ha jól értem, a szempontok a következők: H^{ki} legyen *átlós mátrix*, egyébiránt a szimmetrizált függvénynek, ha azt mint a közönséges analízis függvényét fogjuk fel, az eredetileg adott függvénnyel azonosnak kell lennie.¹⁰ Ezeket a követelményeket közvetlen úton fogjuk kielégíteni.

Ezek után a szerzők megkövetelik, hogy a q_l^{ik}, p_l^{ik} mátrixok egy végtelen egyenlet-rendszernek (a „mozgásegyenleteknek”) tegyenek eleget, melyet ők eredetileg a

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{dq_l}{dt} \right)^{ik} &= \left(\frac{\partial H}{\partial p_l} \right)^{ik}, \\ \left(\frac{dp_l}{dt} \right)^{ik} &= \left(-\frac{\partial H}{\partial q_l} \right)^{ik} \end{aligned} \right\} \quad \begin{aligned} l &= 1, 2, 3, \dots, n; \\ i, k &= 1, 2, 3, \dots, \text{in inf.} \end{aligned} \quad (18)$$

alakban írtak fel. A felső indexpár, ugyanúgy mint korábban F^{ki} esetében, a szóban forgó rendezett függvényhez tartozó mátrix megfelelő elemét jelzi. A jobb oldalon álló parciális differenciálhányadosok jelentését ugyancsak megmagyaráztuk már, a bal oldalon fellépő d/dt szimbólumét azonban még *nem*. Ezen a szerzők a következőt értik: *létezzék* egy olyan

$$v_1, v_2, v_3, v_4, \dots \text{ in inf.} \quad (19)$$

⁹ „Kvantummechanika I.” 873. oldaltól kezdődően.

¹⁰ Az erősebb követelményt, hogy t_i ugyanazon kvantummechanikai mozgásegyenleteket szolgáltatssa, túlságosan szorosnak tartom. Nézetem szerint ez azzal kapcsolatos, hogy a szerzők a q_k -k tekintetében is *hatványszorzatokra* szorítkoznak, ami szükségtelen.

számsorozat, hogy a fenti egyenletek teljesüljenek, ha d/dt -nek a következő jelentést tulajdonítjuk: Az ik indexű mátrixelemet szorozza meg $2\pi\sqrt{-1}(v_i - v_k)$ -val. Speciálisan

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{dq_l}{dt}\right)^{ik} &= 2\pi\sqrt{-1}(v_i - v_k)q_l^{ik}, \\ \left(\frac{dp_l}{dt}\right)^{ik} &= 2\pi\sqrt{-1}(v_i - v_k)p_l^{ik}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

A (19) számsorozat nincs előre meghatározva, hanem a q_l^{ik}, p_l^{ik} mátrixelemekkel együtt a (18) egyenletrendszer ismeretleneit képezi. Ez a d/dt jel (20) értelmezése és a (14), (15) szabályok, valamint (12) tekintetbe vétele mellett a következő alakot ölti:

$$\left. \begin{aligned} (v_i - v_k)q_l^{ik} &= \frac{1}{h}(Hq_l - q_l H), \\ (v_i - v_k)p_l^{ik} &= \frac{1}{h}(Hp_l - p_l H) \end{aligned} \right\} \quad (18')$$

($2\pi\sqrt{-1}$ -gyel egyszerűsítettünk).

Ezt az egyenletrendszert kell tehát kielégítenünk és ehhez más eszköz nem áll rendelkezésünkre, mint a mátrixok képzésekor a közvetítő szerepet betöltő (4) ortogonális rendszer alkalmas választása. Ezek után a következőket állítom:

1. A (18') egyenlet általában kielégíthető oly módon, hogy ortogonális rendszerként a

$$-[H, \psi] + E\psi = 0 \quad (21)$$

parciális differenciálegyenlet természetes peremértékfeladatának *sajátfüggvényeit* választjuk. Itt ψ a q_1, q_2, \dots, q_n változók ismeretlen függvénye; E a sajátértékparaméter. A $\varrho(x)$ sűrűségfüggvény szerepében magától értetődően q_1, q_2, \dots, q_n azon függvénye lép fel, mellyel a (21) egyenletet szoroznunk kell, hogy azt önadjungálttá tegyük. A v_i mennyiségek a h -val osztott E_i sajátértékekkel adódnak egyenlőknek. A H^{kl} mátrix átlóssá lesz; az átlós elemek értéke $H^{kk} = E_k$.

2. Ha a H függvény szimmetrizálását *alkalmas módon* végeztük el (a szimmetrizálási eljárás megítélésem szerint egyelőre nincs egyértelműen meghatározva), úgy (21) azonos a *hullámmechanikám alapját képező hullámegyenlettel*.¹¹

Az 1. alatt kimondott állítások majdnem közvetlenül evidensek, ha egyelőre túltesszük magunkat a kérdéseken, vajon a (21) egyenlet egyáltalán ésszerű peremértékfeladatot határoz-e meg az egész q -tér mint alaptartomány mellett, vajon az mindig önadjungálttá tehető-e alkalmas függvénnel szorozva stb. Ezek a kérdések a 2. alatt kimondott állítások tárgyalása során nagymértékben elintézésre nyerne. Minthogy (21), valamint a sajátértékek és a sajátfüggvények definíciója értelmében fennáll:

$$[H, u_i] = E_i u_i, \quad (22)$$

¹¹ Ann. d. Physik 79, 510, 1926 [(18'') egyenlet].

(6) szerint kapjuk,

$$\begin{aligned} H^{kl} &= \int \varrho(x) u_k(x) [H, u_l(x)] dx = E_l \int \varrho(x) u_k(x) u_l(x) dx = \\ &= 0, \quad \text{ha } l \neq k, \\ &= E_l, \quad \text{ha } l = k; \end{aligned} \quad (23)$$

így pl. írható:

$$\begin{aligned} (H q_l)^{ik} &= \sum_m H^{im} q_l^{mk} = E_i q_l^{ik}, \\ (q_l H)^{ik} &= \sum_m q_l^{im} H^{mk} = E_k q_l^{ik}, \end{aligned} \quad (24)$$

a (18') alatt felírt első egyenlet jobb oldalának értéke tehát:

$$\frac{E_i - E_k}{h} q_l^{ik}. \quad (25)$$

Hasonlóak érvényesek a második egyenletre. Ezzel minden 1. alatt kimondott állítás igazolást nyert.

Térjünk rá most a 2. állításra, azaz: a negatív előjellel vett (alkalmas módon szimmetrizált) Hamilton-függvény operátorának és a hullámmechanika hullámoperátorának azonosságára. Először egy egyszerű példán szeretném megvilágítani, miért nem látszik számomra *egyelőre* a szimmetrizálási eljárás egyértelműnek. Legyen egy szabadsági fok esetén a *közönséges* Hamilton-függvény

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + q^2). \quad (26)$$

Először is természetesen ezt a függvényt változatlanul, úgy ahogy van, átvehetjük „rendezett” függvényként a „kvantummechanika”-ba. Használhatjuk azonban, mégpedig — úgy látszik számomra — *egyelőre* ugyanolyan joggal, a

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{f(q)} p f(q) p + q^2 \right) \quad (27)$$

rendezett függvényt is, ahol $f(q)$ nagymértékben tetszőleges függvény. Ebben az esetben $f(q)$ lépne fel mint $\varrho(x)$ „sűrűségfüggvény”. Nyilvánvaló, hogy (26) csupán egy speciális esete (27)-nek, és felvetődik a kérdés, vajon lehetséges-e általában, azaz bonyolultabb H függvényekre is, kitéüntetni a kívánt speciális esetet és miként történhet ez. Az, hogy ennek érdekében a q_k -kban is hatványszorzatokra szorítkozunk (mikor is egyszerűen megtilthatnánk „nevezők létrehozását”), éppenséggel a legfontosabb alkalmazások esetében igen kényelmetlen volna. Ezen kívül — úgy vélem — ez *nem* a helyes szimmetrizálásra vezet.

Az olvasó kényelme érdekében itt most megismétlem a hullámegyenlet rövid levezetését olyan alakban, mely a jelen célnak megfelel. Eközben a klasszikus mechanika esetére szorítkozom (relativitás és mágneses tér nélkül). Legyen tehát

$$H = T(q_k, p_k) + V(q_k), \quad (28)$$

ahol T a p_k -k kvadratikus alakja. Ekkor a hullámegyenlet a következő variációs feladatból nyerhető:¹²

$$a \quad \delta J_1 = \delta \int \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2} T \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) + \psi^2 V(q_k) \right\} \Delta_p^{-\frac{1}{2}} dx = 0, \quad (29)$$

$$J_2 = \int \psi^2 \Delta_p^{-\frac{1}{2}} dx = 1$$

mellékfeltétel mellett.

Az $\int dx$ szimbólum jelentése, mint fent is, $\int \dots \int dq_1 \dots dq_n$; $\Delta_p^{-\frac{1}{2}}$ a T kvadratikus alak diszkriminánsának reciprokon négyzetgyöke. Ez a tényező semmiképpen nem maradhat el, minthogy különben az egész eljárás nem volna invariáns a q_k -k ponttranszformációival szemben! Felléphetne még ezzel szemben tényezőként a q_k -k egy explicit függvénye, azaz egy olyan függvény, mely a q_k -k ponttranszformációjakor invariánsként transzformálódik. (Ismeretes, hogy Δ_p -re ez nem áll; az ellenkező esetben ugyanis $\Delta_p^{-\frac{1}{2}}$ -et elhagyhatnánk, a mondott járulékosan fellépő függvénynek a $\Delta_p^{\frac{1}{2}}$ értéket adva.)

Jelezzük T azon argumentum szerint képezett deriváltját, mely az eredetileg p_k által elfoglalt helyen áll, p_k -val; ekkor a variáció eredményeként kapjuk:

$$0 = \frac{1}{2} (\delta J_1 - E \delta J_2) =$$

$$= \int \left\{ -\frac{h^2}{8\pi^2} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\Delta_p^{-\frac{1}{2}} T_{p_k} \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right) + \right.$$

$$\left. + (V(q_k) - E) \Delta_p^{-\frac{1}{2}} \psi \right\} \delta \psi dx \quad (30)$$

a variációs probléma Euler-egyenlete tehát a következő:

$$\frac{h^2}{8\pi^2} \Delta_p^{\frac{1}{2}} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left\{ \Delta_p^{-\frac{1}{2}} T_{p_k} \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right\} - V(q_k) \psi + E \psi = 0. \quad (31)$$

Ha visszaemlékszünk az operátor-hozzárendelés törvényére és figyelembe vesszük a T kvadratikus alakra felírt, a homogén függvényekre érvényes

$$T(q_k, p_k) = \frac{1}{2} \sum_k p_k T_{p_k}(q_k, p_k) \quad (32)$$

Euler-egyenletet, úgy nehézség nélkül felismerhetjük, hogy (31) egyenletünk a (21) alakot mutatja. Valóban: ha a (31) egyenlet bal oldalán álló operátort, kirekesztve az $E\psi$ sajátértéktagot, leválasztjuk és benne $\frac{h}{2\pi\sqrt{-1}} \frac{\partial}{\partial q_k}$ -t p_k -val helyettesítjük, úgy (32) alapján a negatív előjellel ellátott (28) Hamilton-függvényt kapjuk. Itt a variációs eljárásból egészen automatikusan egyértelműen meghatározott „szimetri-

¹² Ann. d. Physik 79, 376, 1926 [(23) és (24) egyenlet].

zálás" adódott a H operátor számára, mely azt — egy tényezőtől eltekintve — önadjungálttá és ponttranszformációkkal szemben invariánssá teszi, és amelyhez ragaszkodni szeretnénk mindaddig, amíg egészen határozott okok nem szólnak a fent¹³ a (29) integrálokban lehetségesnek tartott járulékos tényező fellépte, valamint e tényező meghatározott alakja mellett.

Ezzel a Heisenberg—Born—Jordan-féle mátrixegyenletek egész rendszerének megoldását visszavezettük egy lineáris parciális differenciálegyenlet természetes peremértékfeladatára. Ha a peremértékfeladatot megoldottuk, úgy minden mátrixelemet, mely bennünket érdekel, (6) útmutatása szerint differenciálások és kvadraturák segítségével kiszámíthatunk.

Annak megvilágítása céljából, hogy mit kell *természetes* peremértékfeladaton, azaz a konfigurációs tér természetes peremére vonatkozóan előírt peremfeltételeken értenünk, a végigszámolt példákra utalok.¹⁴ Szisztematikusan az adódik, hogy a végtelenben fekvő természetes perem a differenciálegyenlet szingularitását képezi és egyértelműen csak „a sajátfüggvények maradjanak végesek” peremfeltételt engedi meg. Meglehet, hogy ez közös jellemvonása az elmélet alkalmazása során első sorban tekintetbe jövő mikromechanikai problémáknak. Ha a helykoordináták változásának tartománya mesterségesen korlátozva van (példa: „doboz”-ba zárt molekula), úgy ezt a korlátozást elvileg a jól ismert módon, alkalmas potenciálok bevezetésével vehetjük tekintetbe. A sajátfüggvények *eltűnése* a peremen általában messzemenően elégséges mértékben teljesül, még ha *bizonyos* (6) típusú integrálok esetében olyan viszonyokkal kerülünk is szembe, melyek különleges megfontolásokat tesznek szükségessé és amelyekkel a jelen pillanatban nem szeretnénk részletesen foglalkozni (a szóban forgó mátrixelemek a Kepler-probléma esetében — Heisenberg szerint — a hiperbolapályát hiperbolapályával összekötő átmeneteknek felelnek meg).

Itt a klasszikus mechanika esetére szorítkoztam, mágneses tér nélkül, minthogy az elmélet relativisztikus-mágneses általánosítása még nem látszik számomra eléggé tisztázottnak. Abban azonban, hogy a két új kvantumelmélet tökéletes párhuzamosága erre az általánosításra is fenn fog állni, aligha kételkedhetünk.

Végül még egy általános megjegyzés a 2—4. §§ egész képletapparátusához. Az alapul vett ortogonális rendszert minden képletben határozottan *diszkrét* függvényrendszernek tekintettük. A legfontosabb alkalmazások esetében ez éppen *nem* így van. Nem csak a hidrogén atom esetében, hanem a magasabb rendszámú atomok esetében is, a (31) hullámegyenletnek a vonalas spektrum mellett folytonos sajátérték-spektrummal is kell rendelkeznie, mely többek között a sorozathatárhoz csatlakozó folytonos *optikai* színeképeken keresztül nyilatkozik meg. Jobbnak látszott, hogy a képleteket és gondolatmeneteket egyelőre ne terheljük meg ezekkel a valóságban elengedhetetlen általánosításokkal. Hiszen cikkünk célja, hogy a két elmélet között fennálló formális összefüggéseket lehetőleg világosan kimunkáljuk, és ezeket a folytonos spektrum fellépte bizonyosan nem változtatja meg lényegesen. Egy fontos óvatossági rendszabályt mindenkor betartottunk: nem feltételeztük minden további nélkül a sajátfüggvények szerint haladó kifejtés konvergenciáját. Különösen parancsolóan írja elő ezt az óvatosságot a *diszkrét sajátértékek torlódása a végesben* (a sorozathatáron), mely a maga részéről a legszorosabban összefügg a folytonos spektrum felléptével.

¹³ Vö. még Ann. d. Phys. 79, 362 (lásd a megjegyzést az 510. oldalon), 1926.

¹⁴ Vö. a korábban idézett dolgozatokkal.

5. §. A két elmélet összehasonlítása.

Kísérlet a kibocsátott sugárzás intenzitásának és polarizációjának klasszikus értelmezésére

Ha a két elmélet — az egyesszámot is helyénvaló módon használhatnám — jelenlegi alakjában fenntarthatónak bizonyulna, azaz már a bonyolultabb rendszerekre is helyes általánosítást jelentené,¹⁵ úgy mindenfajta fejtegetés az egyiknek vagy a másiknak az előnyéről bizonyos értelemben álproblémával foglalkoznék. Hiszen tisztán matematikai szempontból tekintve a két elmélet teljesen ekvivalens és így csak arról az elvi szempontból alárendelt kérdésről lehet szó, hogy a számítások elvégzése szempontjából melyikük kényelmesebb.

Napjainkban nem csekély azoknak a fizikusoknak a száma, akik — teljesen *Kirchhoff* és *Mach* szellemében — a fizikai elmélet feladatát pusztán a megfigyelhető mennyiségek között fennálló tapasztalati összefüggések *lehetőleg takarékos* matematikai leírásában látják, azaz olyan leírásban, amely az összefüggéseket lehetőleg elvileg megfigyelhetetlen elemek közvetítése nélkül adja vissza. Ilyen beállítottság mellett a matematikai ekvivalencia csaknem egyet jelent a fizikai ekvivalenciával. A jelen esetben legfeljebb abban vélhetnénk a mátrixleírás bizonyos előnyét felismerni, hogy az tökéletesen nem-szemléletes jellege folytán nem okoz kísértést az atomi történekek tér-időbeli képeinek kialakítására, melynek talán elvileg ellenőrizhetetlennek kell maradnia. Ebben az összefüggésben minden esetre érdeklődésre tarthat számot a fent megadott ekvivalencia-bizonyítás következő *kiegészítése*: az ekvivalencia *valóban* fennáll, fennáll *az ellenkező irányban is*. Nemcsak a sajátfüggvényekből lehet, mint fent megmutattuk, a mátrixokat megszerkeszteni, hanem fordítva is, a számszerűen megadott mátrixokból is megkaphatjuk a sajátfüggvényeket. Az utóbbiak tehát egyáltalán nem a pusztá mátrixváz valamiféle *önkéntes* és *speciális*, a szemléletesség igényétől vezérelt „húsba-vérbe öltöztetése”, ami valóban alapot szolgáltatna arra, hogy a mátrixleírást ismeretelméletileg előnyben részesítsük. Gondoljuk el, hogy a

$$q_l^{ik} = \int u_i(x) u_k(x) dx \quad (33)$$

egyenletekben a *bal* oldal számszerűen meg van adva és keressük az $u_i(x)$ függvényeket. (NB: a „sűrűségfüggvényt” szándékosan hagytuk el; most legyenek az $u_i(x)$ -ek *maguk* ortogonális függvények.) Ekkor mátrixszorzás útján kiszámíthatjuk az

$$\int P(x) u_i(x) u_k(x) dx \quad (34)$$

integrálokat, ahol $P(x)$ a q_l -ek *valamely* hatványszorzatát jelenti; ehhez egyébként „áthárítást”, azaz parciális integrálást nem kell alkalmaznunk. Ezen integrálok

¹⁵ Speciális okunk van arra, hogy ezt kérdésesnek tartsuk. Az energiafüggvényt ezidőszert mindkét elmélet a közönséges mechanikából veszi át. Az eddig tárgyalt esetekben a *potenciális* energia olyan tömegpontok kölcsönhatásának felel meg, amelyek közül legalább az *egyik* nagy tömege folytán talán hullámmechanikailag is pontszerűnek tekinthető (vö. *A. Einstein*, Berl. Ber. 1925. 10. old.). Számolnunk kell a lehetőséggel, hogy a potenciális energia kifejezésének átvétele közönséges mechanikából többé nem megengedett, ha a valóságban *mindkét* „ponttöltés” kiterjedt rezgésállapot, melyek egymást átfedik.

össessége rögzített i és k mellett megadja az $u_i(x)u_k(x)$ függvény valamennyi ún. „momentumát”. És tudjuk, hogy a momentumok összessége igen általános feltételek mellett egyértelműen rögzíti a függvényt. Ily módon valamennyi $u_i(x)u_k(x)$ szorzat egyértelműen meg van határozva, közöttük az $u_i(x)^2$ négyzetek, ezekkel együtt pedig maguk az $u_i(x)$ függvények is. Az egyetlen önkény a $\varrho(x)$ sűrűségfüggvény — pl. térbeli polárkoordináták használata esetén az $r^2 \sin \vartheta$ faktor — leválasztásával kapcsolatban forog fenn. Itt minden esetre nem kell ismeretelméleti faut pas elkövetésétől tartanunk.

Egyébiránt a tételnek, mely szerint a matematikai ekvivalencia egyértelmű volna a fizikai ekvivalenciával, különben is csak korlátozott érvény tulajdonítható. Gondoljunk pl. a töltött vezetők rendszerének elektrosztatikus energiáját megadó két kifejezésre, az $\frac{1}{2} \int \mathcal{E}^2 dt$ térfogati integrálra és a vezetőkre kiterjesztett $\frac{1}{2} \sum e_i V_i$ összegre. A két kifejezés az elektrosztatika esetében ekvivalens; az egyik a másiból parciális integrálással nyerhető. Mindazonáltal az első jelentős mértékben előnyben részesítjük és azt mondjuk, hogy az helyesen lokalizálja az energiát a térben. Az elektrosztatika talaján állva ez a választás semmiképp sem alapozható meg; alapul ehhez az szolgál, hogy az első kifejezés az elektrodinamikában is használható marad, a második azonban nem.

Azt, hogy a két új kvantumelmélet közül *ebből* a szempontból melyiket illeti meg az elsőség, ma még aligha lehet bizonyossággal eldönteni. Mint egyikük természetes védőügyvédjének azonban bizonyára nem fogják nekem felróni, ha tartózkodás nélkül — és talán nem teljesen mentesen bizonyos egyoldalúságtól — felhozom az érveket, melyek mellette szólnak.

Azokat a problémákat, amelyek a tulajdonképpeni optikai kérdéseken kívül az atomdinamika további kiépítését illetően tekintetbe jönnek, a kísérleti fizika emí-nensen szemléletes alakban veti fel: pl. miképpen pattan szét egymásról két ütköző atom vagy molekula, milyen eltérítést szenved az elektron vagy az α -rész, ha azt adott sebességgel és területi sebességgel („ütközési paraméterrel”) az atomra löjük? Abból a célból, hogy az ilyen problémához közelebb jussunk, nagymértékben szükséges, hogy világos áttekintést nyerjünk a folytonos átmenetről, mely a szemléletes makroszkopikus mechanikától az atom mikromechanikájához vezet. Legutóbb kifejtettem,¹⁶ miképpen képzelem el ezt az átmenetet. A mikromechanika finomítását képezi a makromechanikának, melyet az objektumok geometriai — mechanikai kicsinysége tesz szükségessé és amely teljesen ugyanolyan jellegű, mint az áttérés a geometriai optikáról a fizikai optikára; ez utóbbi akkor válik szükségessé, amikor a hullámhossz már nem nagyon nagy a vizsgált objektumok vagy azon térbeli tartomány méreteihez képest, amelyen belül pontos felvilágosítást kívánunk nyerni a fény eloszlásáról. — Rendkívül nehéznek látszik számomra a fent jellemzett fajtájú problémák megoldására törekedni, míg ismeretelméleti okokból kötelezőnek érezzük, hogy számúzzuk az atomdinamikából a szemléletességet és csak absztrakt fogalmakkal — amilyenek az átmeneti valószínűségek, energiaszintek stb. — operáljunk.

Ismeretes, hogy az egész atomdinamika számára különösen fontos, talán éppen a legfontosabb kérdés az atomdinamikai történés és az elektromágneses tér — ill. azon fizikai ágens, amelynek esetleg az utóbbi helyére kell lépnie — *csatolásának*

¹⁶ Ann. d. Phys. 79, 489, 1926.

problémája. Nem csak diszperzió, a rezonancia- és szekundérsugárzás, valamint a természetes vonalszélesség egész kérdés komplexuma tartozik ide, hanem bizonyos atomdinamikai mennyiségek emissziós frekvenciaként, vonalintenzitásként történő megjelölése csupán akkor nyer a pusztán dogmatikus kijelentésnél megalapozottabb jelentést, ha a csatolásnak valamilyen formában matematikai leírását adtuk. Az atomdinamika mátrix-megfogalmazása ezzel kapcsolatban arra a sejtésre vezetett, hogy az elektromágneses teret valóban másképpen, nevezetesen mátrixok segítségével *kell* leírunk, hogy a csatolást matematikailag megfogalmazhassuk. A hullámmechanika azt mutatja, hogy erre kényszer minden esetre nem áll fenn, minthogy a mechanikai teret leíró skalár (melyet én ψ -vel jelöltem) teljes mértékben alkalmas arra, hogy az elektromágneses térvektorok között változatlan alakban fennálló Maxwell—Lorentz-egyenletekben is betöltse az elektromágneses tér „forrásának” szerepét, hasonlóan ahhoz, amint — megfordítva — az elektrodinamikai potenciálok a ψ -t meghatározó hullámegyenlet együtthatóiban szerepelnek.¹⁷ Minden esetre érdemes a csatolás leírását egyszer olyan módon *megkísérelni*, hogy a változatlan Maxwell—Lorentz-egyenletekbe *négyesáramként* az elektronmozgás mechanikai terét leíró ψ skalárból (esetleg maguknak a térvektoroknak vagy a potenciáloknak közvetítésével) alkalmas módon leszámaztatott négyesvektort helyettesítsünk be. Sőt, némi remény van arra, hogy a ψ -re vonatkozó hullámegyenletet a Maxwell—Lorentz-egyenletek következményeként foghatnánk fel, nevezetesen az elektromosság kontinuitási egyenleteként. — Ne hallgassuk el azonban a nehézséget, mely a *több*-elektronprobléma esetében onnan származik, hogy ψ a *konfigurációs* térben, nem pedig a közönséges térben értelmezett függvény. Mindazonáltal szeretném az egyelektron-probléma esetében kissé részletesebben megvilágítani, hogy bizonyára lehetséges ily módon a sugárzás intenzitásának és polarizációjának rendkívül szemléletes értelmezését adni.

Vegyük szemügyre a hidrogén atom hullámmechanikai képét valamely állapotban, amelyben a mechanikai teret leíró skalárt diszkrét sajátfüggvényekből álló sor állítja elő:

$$\psi = \sum_k c_k u_k(x) e^{\frac{2\pi\sqrt{-1} E_k}{h} t} \quad (35)$$

(itt x *három* változó, mondjuk r, ϑ, φ összefoglaló jelölésére szolgál; a c_k -kat valószínűségi számoknak gondoljuk és a jobb oldalon a valós részt kell vennünk). Most azt a *feltevést* tesszük, hogy az elektromosság térbeli sűrűségét

$$\psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} \quad (36)$$

¹⁷ Hasonló gondolatokat juttat kifejezésre *Lánczos Kornél* egy nemrég megjelent rövid cikkében (Ztschr. f. Phys. 35, 812, 1926), mely ugyancsak tartalmazza az értékes felismerést, hogy a Heisenberg-féle atomdinamikának is adható folytonos értelmezés. Egyébiránt azonban *Lánczos* munkája a jelen dolgozattal kevesebb pontban érintkezik, mint ahogy azt az első pillanatban gondolhatnánk. *Lánczos* egyelőre még teljesen határozatlanul hagyott képletrendszerének meghatározottá tételét *nem* abban az irányban kell keresnünk, mintha *Lánczos* $K(s, \sigma)$ szimmetrikus magját hullámegyenletünk (21) vagy (31) *Green-függvényével* kellene azonosítanunk. Ennek a *Green-függvénynek* ugyanis, amennyiben létezik, maguk a kvantumszintek a sajátértékei. A *Lánczos-féle* maggal szemben viszont az a követelmény, hogy sajátértékei a *reciprok* kvantumszintek legyenek.

valós része adja meg. A felülvonás jelölje itt a komplex konjugált mennyiséget. A számítás az elektromos töltés térbeli sűrűségére a

$$\text{töltéssűrűség} = 2\pi \sum_{(k, m)} c_k c_m \frac{E_k - E_m}{h} u_k(x) u_m(x) \cdot \sin \frac{2\pi t}{h} (E_m - E_k) \quad (37)$$

kifejezést adja, ahol az összeg mindegyik (k, m) kombinációt csak egyszer tartalmazza. Frekvenciaként (37)-ben immár a termék *különbségei* szerepelnek. Ezek oly kicsinyek, hogy a megfelelő éterhullámhossz nagy az atomi méretekhez képest, azaz ahhoz a tartományhoz képest, amelyen belül (37) egyáltalán számottevően különbözik zérustól.¹⁸ A kisugárzás ennek folytán egyszerűen az egész atom (37) alapján képezett *dipólmomentuma* segítségével számítható. Szorozzuk meg (37)-et az egyik q_l Descartes-koordinátával és a $\varrho(x)$ „sűrűségfüggvénnyel” (az adott esetben $r^2 \sin \vartheta$ -val), és integráljunk az egész térre. A dipólmomentum q_l irányába eső komponensére (13) felhasználásával kapjuk:

$$M_{q_l} = 2\pi \sum_{(k, m)} c_k c_m q_l^{km} \frac{E_k - E_m}{h} \sin \frac{2\pi t}{h} (E_m - E_k). \quad (38)$$

Láthatóan az atom elektromos momentumának „Fourier-kifejtését” nyertük, melyben frekvenciaként csak a termék *különbségei* lépnek fel. Az együtthatókban a q_l^{km} Heisenberg-féle mátrixelemek oly módon lépnek fel, hogy azok meghatározó befolyása az emittált sugárzás megfelelő részének intenzitására és polarizációjára a klasszikus elektrodinamika alapján tökéletesen érthetővé válik.

A sugárzás mechanizmusáról fent közölt vázlatos megfontolás még távolról sem teljesen kielégítő és semmiképpen sem végleges. A (36) feltevés némileg szabadon él a komplex számítási apparátus nyújtotta lehetőségekkel azon nem kívánt rezgési komponensek kiküszöbölésére, amelyek sugárzása egyáltalán nem vizsgálható egyszerűen a teljes atom dipólmomentuma segítségével, minthogy a megfelelő éterhullámhosszak ($\sim 0,01 \text{ \AA}$) lényegesen kisebbek az atomi méreteknél. Továbbá a (37) térbeli sűrűség, ha azt az egész térre integráljuk, (5) szerint zérust ad, nem pedig — mint azt meg kell kívánnunk — egy véges, időtől független értéket, melyet az elektron töltésére kellene normálnunk. Végezetül tekintetbe kellene vennünk még a mágneses sugárzást is, minthogy térbeli elektromos árameloszlás jelenléte esetén sugárzás akkor is lehetséges, ha elektromos momentum egyáltalán nem lép fel, mint pl. egy keretantenna esetében.

Mindazonáltal jól megalapozottnak látszik a remény, hogy az itt vázolthoz igen hasonló analitikus mechanizmus alapján valóban sikerül majd eljutni az emittált sugárzás természetének igazi megértéséhez.

Fordította: Györgyi Géza

¹⁸ Ann. d. Phys. 79, 371, 1926.

KÖNYVISMERTETÉS

Fenyves E., Haiman O.: Die Physikalischen Grundlagen
der Kernstrahlungsmessungen

(Akadémiai Kiadó, Budapest, 1965.)

Nehéz lenne jobb szerzőpárt találni magsugárzások vizsgálatát tárgyaló könyv megírására, mint Fenyves Ervin és Haiman Ottó. A szerzők mindegyike két évtized óta foglalkozik a témával, óriási tárgyi ismeretanyaggal és sokoldalú tapasztalatokkal rendelkeznek a sugárzás detektálás elmélete és gyakorlata terén egyaránt. Ez a kiinduló feltétel biztosítja azt, hogy a „Magsugárzások mérésének fizikai alapjai” című könyvük várhatólag osztatlan sikert arat az érdeklődő olvasók táborában.

A művet az elméleti és kísérleti érdeklődésű fizikusok, sugárzás-mérési és sugár-védelmi szakemberek, sugárzás-vizsgálattal foglalkozó mérnökök egyaránt használhatják a témakör fizikai alapjait kitűnően ismertető monográfiaként. A gyakorlati jellegű kiegészítések, a módszertani részek, és a kiértékelésekkel foglalkozó rész a kimondottan alkalmazásokkal foglalkozók számára is rendkívül hasznosak. Eppen abban a vonatkozásban különbözik ez a könyv a nukleáris sugárzás mérésről az utóbbi években megjelent egyéb monográfiáktól, hogy míg azoknál a módszerek és berendezések technikai vonatkozásai vannak előnyben részesítve, Fenyves és Haiman a fizikai alapelvek elemzésére helyezi a fő hangsúlyt. Természetesen emellett kellő helyet biztosítanak a metodikai és technikai kérdéseknek is.

A szerzők ugyanakkor — a nagyenergiájú fizikában való jelentőségüknek megfelelően — a nyomdetektorok problémáit is részletesen tárgyalják.

A könyv kilenc fejezetre oszlik; és három függelék egészíti ki a felvetett témákat. Ezek a következők:

- I. fejezet: Bevezetés és történeti áttekintés
- II. fejezet: Nukleáris részecskék kölcsönhatása anyaggal
- III. fejezet: Magsugárzás áthaladása véges vastagságú abszorbensen
- IV. fejezet: A detektor-közégek alapjelenségei
- V. fejezet: Részecskeszámlálók működése és felépítése
- VI. fejezet: A részecskék legfontosabb fizikai jellemzőinek meghatározása számlálási módszerekkel
- VII. fejezet: Magsugárzások összrészecske számának, összenergiájának és dózisének meghatározási módszerei
- VIII. fejezet: Nyomdetektorok működése és felépítése
- IX. fejezet: Részecskék fizikai jellemzőinek meghatározása a nyomaik vizsgálata alapján
- I. függelék: Számlálók és nyomdetektorok alkalmazása az elemi részecskék felfedezésében
- II. függelék: A mérési eredmények statisztikai kiértékelése
- III. függelék: Elektronikus erősítés, diszkriminálás, számlálás

Az egyes fejezeteken (ill. függelékeken) belül a szerzők alapos vizsgálat alá vesznek lényeges elvi és gyakorlati területeket. Alapvető és általános fizikai ismereteket tartalmaz a II. és III. fejezet, ahol többek között a sugárzási részecskék elektromágneses és mag-kölcsönhatásai, töltött részecskék és neutronok szórása, átmeneti effektusok és kaszkád folyamatok elemzése szerepel. Rendkívül jelentős a IV. fejezetben a Cserenkov számlálás és a nyomdetektorok alapjelenségeinek ismertetése. De ugyanilyen plasztikusan világítják meg a többi fejezetek a felvetett témákat, a G. M.-számlálástól a részecskék tömegének, töltésének és élettartamának mérésére vonatkozó módszerekig.

A mű az idevágó irodalmat 1961-ig bezárólag veszi figyelembe, és mivel fő elve a fizikai alapo k tárgyalása volt, a hivatkozásokban a klasszikus irodalom dominál.

Didaktikailag korszerű elvek alapján, kitűnően felépített a könyv. A szerzők eltekintenek a szigorú időrendi felosztástól, a fejlődés egyes fokait nem időszерinti sorrendben, hanem a logikai összetartozás alapján adják elő. Ennek megfelelően a könyv lényegében hármas tagozódású: a) a sugárzás integrált hatásait, b) részecske detektorokat, c) nyomdetektorokat tárgyaló részből áll. Ezek a kategóriák természetesen nem elválasztva, hanem egymással összefüggésben szerepelnek.

A szöveget és a formulákat mindenütt ábrák és fotók egészítik ki, amelyek szemléletessé teszik az anyagot és rögzítését megkönnyítik.

Annak ellenére, hogy a szerzők nem ragaszkodtak az időbeli sorrendhez, a mű nagyon jól érzékelteti, hogy a témakörre vonatkozó ismereteink folyton bővülnek és finomodnak. Arra is utal, hogy ez a folyamat napjainkban is tart, és ismereteink nem megkövesedettek.

Nagy erény, hogy az átfogott óriási anyag ellenére sikerült a szerzőknek egységes elv alapján megoldani a könyv felépítését.

Mindezek együttesen jelentik azt, hogy a magyarországi és nemzetközi fizikai irodalom egy nagyszerű művel gazdagodott. Az ipari-technikai alkalmazásokkal foglalkozók viszonylag szélesebb köre számára célszerű lenne a könyv magyar nyelvű megjelentetése esetleg rövidített formában.

Elismerés illeti az Akadémia Kiadó dolgozóit a gondos, ízléses és nyomdahibák kiküszöbölésére ügyelő munkájukért.

Kirschner István

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1966 IV. 7. — Pédányszám: 600 — Terjedelem: 7 (A/5)ív

66-6245 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bitó János</i> : Kisülések szondamérései II.	297
<i>Daróczy Sándor</i> : Proton-emisszióval járó radioaktív átalakulások	317
<i>Pintér Ferenc</i> : Molekulák közötti kölcsönhatások vizsgálata a Raman spektroszkópia módszerével	341

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>E. Schrödinger</i> : A Heisenberg—Born—Jordan-féle kvantummechanika viszonya az enyémhez	359
---------------------------------------------------------------------------------------------------	-----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Fenyves E, Haiman O.</i> : Die Physikalischen Grundlagen der Kernstrahlungsmessungen (<i>Kirschner István</i>)	375
---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIV. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A KOZMIKUS SUGÁRZÁS KITERJEDT LÉGIZÁPORAINAK RÉSZECSKESZÁM SZERINTI ELOSZTLÁSA NAGY RÉSZECSKESZÁM ESETÉN*

SOMOGYI ANTAL

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

I. BEVEZETÉS

1. Történeti áttekintés	377
2. Elemirész-fizikai és asztrofizikai szempontok	379
3. Az elemi kölcsönhatások néhány tulajdonsága a 10^{10} — 10^{14} eV energiatartományban	381
4. Az elemi kölcsönhatások néhány tulajdonsága 10^{10} eV-nál nagyobb energiákon	383
5. A kiterjedt légizáporok számspektruma és sűrűség spektruma. Célkitűzés	386

II. A KITERJEDT LÉGIZÁPOROK SZÁMSPEKTRUMÁNAK ÉS SŰRŰSÉGSPEKTRUMÁNAK MÉRÉSI MÓDSZEREI

1. A számspektrum közvetlen mérése	391
2. A sűrűség spektrum mérése	392
3. A számspektrum mérése, ha az oldalszerkezet minden záporban ugyanaz	397
4. A mérési tartomány becslése	403
5. Összefoglalás	405

III. A KITERJEDT LÉGIZÁPOROK SZÁMSPEKTRUMÁNAK MEGHATÁROZÁSÁRA VÉGZETT MÉRÉS ISMERTETÉSE

1. A mérési módszer általános jellemzése	405
2. A mérőberendezés leírása	406
3. A fényképfelvételek kiértékelése. A ködkamra felbontóképessége	411
4. Az adatfeldolgozás statisztikai módszerei	416
5. Az eredmények: a számspektrum alakja, a mérési tartomány becslése	422
6. Más szerzők mérései	424

IV. AZ ELEMİ KÖLCSÖNHATÁSOK TERMÉSZETE 10^{14} eV FELETT

1. A nukleon — elektron kaskád	429
2. Az elemi kölcsönhatások tulajdonságainak energiafüggése	430
3. A kiterjedt légizáporok oldalszerkezetének energiafüggetlensége	430

V. ÖSSZEFOGLALÁS. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁSOK IRODALOMJEGYZÉK

I. Bevezetés

1. Történeti áttekintés

1938-ban Auger és munkatársai [1], s velük egyidőben Jánossy [2a], valamint Kolhörster, Matthes és Weber [2b], azt észlelték, hogy két Geiger—Müller cső koincidenenciákat jelez akkor is, ha két számlálócső ugyanabban a vízszintes síkban fekszik és távolságuk több tíz méter. E koincidenenciák száma jóval nagyobb,

* Doktori disszertáció. Megvédve 1965. jún. 5.-én.

semhogya azt véletlen eseményekkel magyarázni lehetne. A felfedezők úgy értelmezték a jelenséget, hogy a primer kozmikus sugárzás igen nagy energiájú részecskéi az atmoszférában kaszkád folyamatot indítanak meg, s a keletkezett részecskezápór nagy területre szóródik szét. Ezt a jelenséget nevezzük kiterjedt légizáporoknak (a továbbiakban KLZ).

A felfedezők értelmezése alapján véve ma is helytálló, részleteiben természetesen sokat módosult. 1938-ban még az volt a vélemény, hogy a primer kozmikus sugárzás elektronokból és pozitronokból áll, s ebbe a képbe nagyon beleillett az a megfigyelés, hogy a KLZ-ok túlnyomórészt (az akkori megfigyelések szerint mintegy 98%-ban) elektronokból, pozitronokból és fotonokból állnak (lágy komponens). Néhány „áthatoló” részt (műonok, magaktív részek) kezdetben is megfigyeltek már KLZ-okban [3], pontos azonosításuk és jelenlétük magyarázata azonban csak jóval később vált lehetségessé.

A fotóemulziós módszer technikájának hallatlan finomítása azonban gyökeresen megváltoztatta a primer kozmikus sugárzásról alkotott képünket. Ballonokkal nagy magasságokba felküldött emulziók segítségével kimutatták, [4] hogy a primer kozmikus sugárzás túlnyomórészt protonokból és nehezebb atommagokból áll (1948); Powell és munkatársai [5] ugyanezzel a módszerrel felfedezték a pozitív és negatív pionokat (1947). Nyilvánvalóvá vált, hogy a KLZ-okat elindító elektronok vagy fotonok nem primer részecskék. Keletkezésük magyarázatára *Oppenheimer* már 1947-ben feltételezte [6], hogy vannak semleges mezonok, amelyek fotonokra bomlanak. Ezek kísérleti kimutatása minden kétséget kizáróan azonban csak 1950-ben sikerült *Steinberger*, *Panofsky* és *Stellernek* [7]. A KLZ-ok elektron-foton komponense tehát úgy jön létre, hogy nagyenergiájú magaktív részek a levegő atommagjaival ütközve semleges pionokat hoznak létre, ezek $(2,8 \pm 0,9) \cdot 10^{-16}$ sec felezési idővel [8] két gamma-kvantumra bomlanak, s ezek a gamma-kvantumok indítják el a KLZ-ok elektron-foton komponensét.

Az elektron-foton komponens tehát — bár számaránya miatt a KLZ-ok legfeltűnőbb jelensége — tulajdonképpen alárendelt jelentőségű a KLZ-ban lejátszódó nukleonkaszkád mellett. Ez utóbbiban általában többször is keletkeznek semleges pionok, tehát az elektron-foton komponens nem egyetlen primer fotontól származó, egységes elektron-foton kaszkád, hanem több, különféle energiájú, különféle magasságokban keletkező fotonok indította kaszkádok szuperpozíciója.

A KLZ-ok tulajdonságainak tisztázására, különösen 1947—48 óta, egyre fokozódó kutatómunka folyik. Nagyjelentőségű technikai lépés volt az áttérés a KLZ-ok egy statisztikus alapokon kiválasztott csoportjának vizsgálatáról egyedi záporok tulajdonságainak vizsgálatára [9]. Ezzel lehetővé vált a záporok átlagos jellemzőin kívül a fluktuációk vizsgálata is, aminek fontosságára *Jánossy* már 1953-ban rámutatott [10]. Ezek a kutatások azonban csak az elmúlt években indultak meg nagyobb erővel. Ma már közepes energiákon (10^{14} — 10^{16} eV között) jól ismerjük a KLZ-ok átlagos szerkezetét, elsősorban természetesen az elektron-foton komponensét. A további feladatok — a fluktuációvizsgálatokon kívül — különösen a nagyenergiájú ($> 10^{16}$ eV) záporok szerkezetének vizsgálata és az áthatoló komponens pontosabb megismerése.

2. Elemirész-fizikai és asztrofizikai szempontok

Már az első becslések arra mutattak, hogy a KLZ-okat elindító primer rész energiája még a kozmikus sugárzásban megszokott nagy energiákhoz képest is óriási: legalább 10^{13} eV, de elérheti a 10^{19} eV-ot is.* Az utolsó ötven év tapasztalatai arra mutattak, hogy az egy részecskére koncentrált energia növelése mindig lényegesen új fizikai megismerésekre vezetett. A sorozat a radioaktív részecskékre koncentrált néhány MeV-nyi energiával felfedezett magreakciókkal s az atommagot alkotó elemi részek felfedezésével kezdődött, néhány száz MeV-nyi energiának egyetlen protonra való koncentrálása mesterséges pionok előállítását tette lehetővé; néhány GeV-nyi energiával kaonokat lehetett előállítani; 5–10 GeV-nyi energia az anti-barionok felfedezésére vezetett. Az erős kölcsönhatások természetének tanulmányozása 10 GeV körüli energiákon nagyon valószínűvé tette a nukleon-mag létezését [12], bár az újabb vizsgálatok eredményei között vannak olyanok, amelyek ezzel a modellel nehezen egyeztethetők össze (pl. a többszörös mezonkeletkezésről észlelt aszimetriák [13]).

Kézenfekvő a gondolat, hogy az egyes részecskékre koncentrált energia még további növelése ismét új jelenségek és törvények felfedezésére vezethet. Az utóbbi években több kísérlet történt ilyen jelenségek elméleti előrejelzésére, illetőleg kísérleti kimutatására.

Az elméleti elgondolások egyik csoportja arra mutat, hogy igen nagy energiákon a gyenge kölcsönhatások jellege megváltozik [14], egy másik elméleti út pedig egy elemi távolság esetleges létezésére utal [15]. Mindkét elgondolás szerint az elemi kölcsönhatások természetében olyan energiákon várhatók változások, amelyeken a kölcsönható részek De Broglie hullámhossza tömegközépponti rendszerben mintegy 10^{-16} cm alá csökken. Ez nukleonok esetében, laboratóriumi rendszerben mintegy 10^{14} eV energiának felel meg.

Ilyen óriási energia, egy részecskére koncentrálván, csak a kozmikus sugárzásban található, s az ilyen részecskék gyakorisága rendkívül kicsi: 10^{14} eV-nál nagyobb energiájú kozmikus sugárzási részek intenzitása az atmoszféra tetején nagyságrendileg 10 részecske $m^{-2}nap^{-1}$ (vö.[66]), a 10^{15} eV-nál nagyobb energiájúak intenzitása pedig már mintegy százszor kevesebb.

Az intenzitás kicsisége szabja meg a megfigyelési módszert: Néhányszor 10^{14} eV energiájú részek észlelése 30–40 km magasságba felküldött óriási emulziós tömbökkel még remélhető, ha a 1/2–1 hektoliternyi emulziót sikerült tíz–húsz órán át ebben a magasságban besugározni. 10^{15} eV-nál nagyobb energiájú részecskék ily módon való észlelése azonban kilátástalan: ilyen részecskék kölcsönhatásainak tanulmányozása csak közvetve, az atmoszférában létrehozott óriási méretű nukleon-elektron kaszkádok, vagyis a KLZ-ok útján lehetséges.

A KLZ-okra vonatkozó kísérleti eredmények azonban általában a mellett szólnak, hogy az elemi kölcsönhatások tulajdonságaiban nem történik lényeges (nagyságrendi) változás a 10^{14} eV– 10^{16} eV energiatartományban. Két jelenség egészen a legutóbbi időig ellentmondásban volt ezzel a képpel. Az egyik a KLZ-ok magaktív komponensének számaránya (pontosabban: e számarány függése a primer energiától), a másik pedig a KLZ-ok részecskeszám szerinti eloszlásának alakja.

* Az eddig észlelt legnagyobb záport elindító részecske energiája körülbelül $1,0 \cdot 10^{20}$ eV volt [11].

Régebbi mérések [17] szerint a magaktív részek száma (N_M) az olyan KLZ-ban, amelyben az összes ionizáló részek száma N , a következő kifejezéssel írható le:

$$N_M = c \cdot N^\alpha,$$

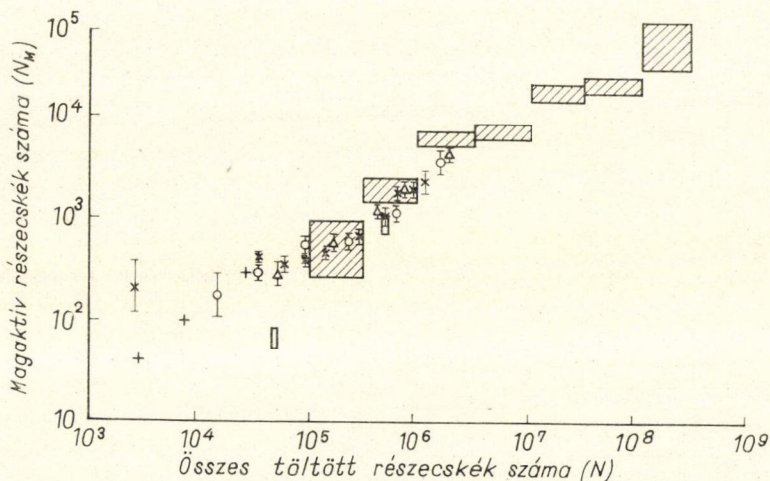
ahol $\alpha \approx 0,5$ ha $N \lesssim 10^5$,

míg $\alpha \approx 1,0$ ha $N \gtrsim 10^5$.

Vagyis a magaktív részek arányszáma $N = 5 \cdot 10^5$ táján (ami néhányszor 10^{14} eV primer energiának felel meg) hirtelen megnő. Újabb mérések szerint [18] azonban N_M és N összefüggése a teljes mérési tartományban jól közelíthető az

$$N_M = c \cdot N^{0,6} \quad (1)$$

összefüggéssel. (l. 1. ábra) Egyes vélemények szerint ez a kérdés még nincs ugyan lezárva, [19], azonban nagyon valószínű, hogy a régebbi mérések értelmezése hibás volt és nincsen szó a magaktív részek arányszámának hirtelen változásáról. Az arányszám (1)-el jellemzett folytonos változása összeegyeztethető az elemi tulajdonságok kölcsönhatásának energiafüggetlenségéről alkotott általános képpel.



1. ábra. A magaktív részek száma (N_M) adott össz-részecskeszámú (N) KLZ-ban

A KLZ-ok részecskeszám szerinti eloszlásának alakja a legutóbbi időkig is sok vitára adott alkalmat [19, 20]. A probléma megoldása céljából — a befolyásoló tényezőknek az eddigieknél pontosabb mérlegelésével — újabb mérést végeztünk [21], amely a kérdést olyan értelemben döntötte el, hogy a számspektrum* alakja is összeegyeztethető azzal a feltételezéssel, hogy az elemi kölcsönhatások tulajdonságai — legalábbis mintegy 10^{16} – 10^{17} eV energiáig — nagyjából függetlenek az energiától (nem mutatnak nagyságrendi változást).

* A továbbiakban „a KLZ-ok részecskeszám szerinti eloszlása” helyett a rövidség kedvéért a „számspektrum” kifejezést használjuk.

Ebben a dolgozatban az erre vonatkozó vizsgálatainkat foglaljuk össze. A számspektrum-probléma részletes ismertetése előtt célszerűnek látszik összefoglalni azokat a kísérleti tényeket, amelyek az elemi kölcsönhatások természetére vonatkozóan a 10^{10} – 10^{14} eV, ill. a 10^{14} eV-nál nagyobb energiák tartományában eddig ismereteseek.

A most tárgyalt elemirész-fizikai szempontokon kívül a KLZ-ok vizsgálata asztrofizikai szempontból is nagy jelentőségű, mert a KLZ-ok útján ismerhetők meg a primer kozmikus sugárzás 10^{14} eV-nál nagyobb energiájú összetevőjének tulajdonságai, ami a KLZ-ok eredetének és bizonyos fokig a kozmikus térségek fizikai tulajdonságainak megismeréséhez vezethet.

Fontos kérdés például a nagyenergiájú primer részek irányeloszlásának izotróp vagy anizotróp volta. Erre vonatkozólag a KLZ-ok csillagidőszerinti esetleges periodicitása és a záportengelyek interstelláris térbeli irányának eloszlásából lehet következtetéseket levonni. Asztrofizikai szempontból is különösen fontos a KLZ-ok számspektrumának lehetőleg pontos ismerete: a számspektrumból ugyanis a primer sugárzás energiaspektruma határozható meg és megállapítható például, hogy mekkora az a legnagyobb energia, ami még egy atommagra koncentrálna előfordul a világűrben.

E kérdések tárgyalása kívül esik ennek az értekezésnek célkitűzésein.

3. Az elemi kölcsönhatások néhány tulajdonsága a 10^{10} – 10^{14} eV energiatartományban

a) Rugalmatlan hatáskeresztmetszetek

A nukleon-nukleon rugalmatlan ütközés hatáskeresztmetszetét kozmikus sugárzási részek segítségével is csak kb 30 GeV-ig mérték [22] az eredmény $\sigma = 35 \pm 11$ mb jól egyezik a gyorsítók segítségével mért értékekkel $\sigma = 34 \pm 3,3$ mb [23] és ezekkel együtt arra mutat, hogy a nukleon-nukleon ütközés hatáskeresztmetszete 10–30 GeV között állandó.

A kozmikus sugárzás magaktív komponensének a levegő atommagjaival (nitrogén, oxigén) való ütközését vizsgálva, e kölcsönhatás rugalmatlan hatáskeresztmetszetét Grigorov és munkatársai néhányszor 10^{11} eV energián $\sigma = 280 \pm 40$ mb-nak találták [24a]. Hasonló eredményt kaptak Szmorodin és munkatársai [24b], néhányszor 10^{12} eV energián $\sigma = 250 \pm 30$ mb). A kozmikus sugárzás magaktív komponense túlnyomórészt (60–80 %-ban) nukleonokból áll [25], ezért Grigorov és Szmorodin eredményeit tekinthetjük a nukleon-nitrogén (oxigén) ütközés rugalmatlan hatáskeresztmetszetének is. Összevetve ezt gyorsítók segítségével 5 GeV, ill. 15 GeV-en [26a, b] végrehajtott nukleon-szénmag ütközések rugalmatlan hatáskeresztmetszetével $\sigma = 220 \pm 10$ mb, ill. $\sigma = 215 \pm 5$ mb), megállapíthatjuk, hogy a nukleon-könnyű mag (szén, nitrogén, oxigén) ütközések hatáskeresztmetszete az $5 \cdot 10^9$ eV– 10^{12} eV energiatartományban nem mutat energiafüggést a jelenlegi mérési pontosság mellett.

A nukleon-nehéz magok rugalmatlan ütközési hatáskeresztmetszetének energiafüggétlenségére következtethetünk abból a kísérleti megállapításból [27], hogy a protonok rugalmatlan ütközési szabad úthossza emulzióban 6,2 GeV és 250 GeV között a kísérleti hibák határain belül állandó.

b) A szekunder részek természete

Ködkamrával és fotoemulzióval 10^{13} eV és 10^{14} eV között végzett mérések egybehangzóan arra az eredményre vezettek, hogy a pionnál nehezebb töltött szekunder részek aránya az összes töltött szekunder részek számához körülbelül $0,20 \pm 0,05$, függetlenül az energiától (10^{10} eV felett a hiba $\pm 0,10$) [28].

c) A szekunder részek száma (multiplicitása)

Az átlagos multiplicitás (n) nő a primer energiával (E), az összefüggés alakja azonban a nagy fluktuációk és egyéb kísérleti nehézségek miatt csak durva közelítéssel ismeretes. A mérési eredmények elég jól megegyeznek egy

$$\langle n \rangle = 2,7 (E/1 \text{ GeV})^{1/4}$$

típusú összefüggéssel, de más összefüggések (pl. $\sim E^{1/3}$) sem zárhatók ki (l. pl. [28], [29]).

d) A szekunder részek szögeloszlása

A tömegközépponti rendszerbeli szögeloszlás 10^{12} eV primer energia felett erős anizotrópiát mutat: 90° körüli irányokban kevesebb rész emittálódik, mint előre és hátra irányokban [13a]. Találtak olyan szögeloszlásokat is, amelyek tömegközépponti rendszerben erős előre-hátra aszimmetriát mutattak [13b]. Az eredményeket a kétcentrum-modellek egyik változatával, az úgynevezett tűzgömb-moddellel értelmezték [13a]. Az előre-hátra irányban erősen aszimmetrikus eseteket úgy magyarázták, hogy ezekben az esetekben két tűzgömb helyett csak egy gerjesztődik. Az interpretációk még további kísérleti megerősítésre és elméleti alátámasztásra szorulnak, az aszimmetrikus szögeloszlásokat azonban tényként fogadhatjuk el.

e) A szekunder részek impulzuseloszlása

Töltött részek impulzusa a legkedvezőbb esetekben néhányszor 10^{10} eV/c-ig mérhető mágneses térbe helyezett ködkamrával. Ilyen módszerrel végzett mérések [13b] szerint a mintegy 10^{11} eV energiájú nukleon-nukleon ütközésekben keletkező szekunder részek impulzus-spektruma $0,3 \text{ GeV/c}$ -nél elért maximum után igen gyorsan, közelítőleg exponenciálisan esik. 10^{12} – 10^{13} eV primer energiákon a töltött szekunder részek impulzusa többnyire nem mérhető. A semleges pionok impulzus-eloszlása azonban a belőlük keletkező gamma-részek impulzus-eloszlásából meghatározható: a gamma-részek energiáját az általuk létrehozott kaszkádok alapján lehet mérni. E mérések [30] szerint a semleges pionok impulzus-spektruma is igen meredeken, közelítőleg exponenciálisan esik.

f) A szekunder részek transzverzális impulzusa

Érdekes és kísérletileg elég jól igazolt tény, hogy a szekunder részek transzverzális (vagyis a primer rész irányára merőleges) impulzusának átlaga független a primer energiától (néhány GeV-től néhány ezer GeV-ig terjedő primer energia-tartományban) és a transzverzális impulzus eloszlásának alakja sem mutat energiafüggést (l. pl. [13], [29], [30]). Az eloszlás alakja jól közelíthető a következő függvénnyel

$$g(p_t) dp_t = \frac{p_t}{p_0} e^{-p_t/p_0} d\frac{p_t}{p_0},$$

ahol $2p_0 = \langle p_t \rangle \approx 0,4 \text{ GeV/c}$. Az állítás — a jelenlegi kísérleti pontosság mellett — egyaránt vonatkozik nukleon-nukleon, pion-nukleon és nukleon-mag ütközésekre és mindenféle fajta szekunder részre is. Csak igen kicsi ($\sim 10 \text{ GeV}$) primer energiákon sikerült kimutatni, hogy a transzverzális impulzus átlaga lassan nő a szóbanforgó szekunder részek tömegével [31].

g) Nagyenergiájú ütközések rugalmassági tényezője

Laboratóriumi rendszerben rugalmatlansági tényezőt értjük a szekunder részek energiájának és a primer rész energiájának hányadosát. E fogalomnak csak akkor van értelme, ha a primer rész az ütközés után is „felismerhető marad”. Barion-barion ütközésben a nagyobbik energiájú kilépő bariont tekintjük „azonosnak” a primerrel, barion-mag ütközésben a legnagyobb energiával kilépő bariont, pion-nukleon ütközésben a legnagyobb energiával kilépő piont, stb. Kis (néhány GeV-nyi) energiájú pion-nukleon ütközésekben kimutatták, hogy a legnagyobb energiával kilépő pion töltése többnyire ugyanaz, mint a beérkező pioné [32] ez is amellet szól, hogy a legnagyobb energiával kilépő rész igen szoros kapcsolatban van a primerrel.

9 GeV energiájú proton-proton ütközések rugalmatlansági tényezője 0,55 [33]. Nagyobb energiákon a szekunder részek energiája közvetlenül nem mérhető, így a rugalmatlansági tényezőt csak bizonyos feltevésekkel lehet számítani (fel kell tételezni, hogy minden egyes szekunder rész transzverzális impulzusa $0,4 \text{ GeV/c}$). Valamennyi eredmény (egészen 10^{14} eV -ig végeztek ilyen méréseket) megegyezik abban, hogy a rugalmatlansági tényező értéke nem változik az energiával és átlagos értéke $0,4 + 0,5$ körül van ($\pm 0,1$ körül statisztikus hibával) [34].

4. Az elemi kölcsönhatások néhány tulajdonsága 10^{14} eV -nál nagyobb energiákon

Kérdés, mennyiben érvényesek, vagy hogyan változnak a 3. pontban említett kísérleti eredmények 10^{14} eV primer energia felett. Választ, mint már említettük, csak a KLZ-ok tanulmányozása útján várhatunk. Nyilvánvaló, hogy a KLZ-ok nyújtotta információ nagyon közvetett: az atmoszféra tengerszinten körülbelül 15 ütközési szabad úthossznyi mélységű (a primer protonok számára), tehát az első kölcsönhatások tulajdonságai csak nagyon elhomályosodva észlelhetők. Ezen felül, az egész KLZ jelenségben az észlelés szempontjából legkönnyebben hozzáférhető rész az elektron-foton komponens, amely csak másodlagos kísérője az elemi kölcsönhatások tulajdonságait hordozó mag-kaszkádnak. Éppen ezért pozitív tényként kell értékelni azt a körülményt, hogy a fenti 3a)—g) pontok közül négyben — és pedig a hatáskeresztmetszet, a szekunder részek anizotrópiája, transzverzális impulzusa és a rugalmatlansági tényező kérdésben — közelítő törvényeket lehetett megállapítani 10^{14} eV energia felett is. E törvények természetesen nem nukleon-nukleon ütközésekre, hanem „primer rész”-levegő mag (nitrogén, oxigén) ütközésekre vonatkoznak, a „primer rész” az esetek túlnyomó többségében nukleon (kisebb százalékban alfa-rész, nehezebb mag vagy pion). A KLZ-ok vizsgálata alapján a következőket lehetett megállapítani:

a) A hatáskeresztmetszet alsó határára durva becslést nyerhetünk azon megfontolás alapján, hogy a KLZ abszorpciós tényezője nem lehet nagyobb, mint a primer részecskék abszorpciós tényezője. Ily módon

$$\sigma \gtrsim 150 \text{ mb}$$

adódik, ami megfelel a kisebb energiákon nyert eredményeknek [24c].

A szóban forgó hatáskeresztmetszet közelítő értéke meghatározható az adott összrészecskeszámú záporok müon-komponensének fluktuációja alapján is [35], az ily módon nyert eredmény értéke

$$\sigma = 270 \pm 50 \text{ mb.}$$

Ez utóbbi vizsgálatokat körülbelül 10^{16} eV primer energiákon végezték, ezért állíthatjuk, hogy a szóban forgó hatáskeresztmetszet értéke mintegy 50%-on belül állandó a 10^{10} – 10^{16} eV-ig terjedő tartományban.

b) A kölcsönhatásban keletkező szekunder részek szögeloszlása 10^{16} eV felett sem lehet izotróp, mert ez ellentmond a KLZ-ok magaktív- és müonkomponense oldalirányú sűrűségeloszlásának: ezek a 10^{16} eV primer energiákon kísérletileg megállapított sűrűségeloszlások — a primer rész irányától távolodva — túlságosan meredeken esnek ahhoz, hogy a primer kölcsönhatások szekunderjei izotróp szögeloszlásúak lehetnének [36].

c) A szekunder részek transzverzális impulzusának nagyságrendjét a KLZ-okban található igen nagy energiájú magaktív részek, ill. müonok átlagos távolsága alapján becsülhetjük meg. 10^{12} eV energiájú magaktív részek átlagos távolsága ≈ 1 m [37], egybevetve ezt a magaktív részek átlagos szabad úthosszával, 1 GeV/c nagyságrendű transzverzális impulzus adódik. A $\approx 10^{12}$ eV energiájú müonok a záportengely körül mintegy 10 m átmérőjű körben helyezkednek el [38]; a müonok keletkezésének átlagos magasságát 10–16 km-nek tételezve fel, a transzverzális impulzusra 0,6 GeV/c körüli értéket nyerünk. Az adatok 10^{15} eV körüli primer energiákra vonatkoznak.

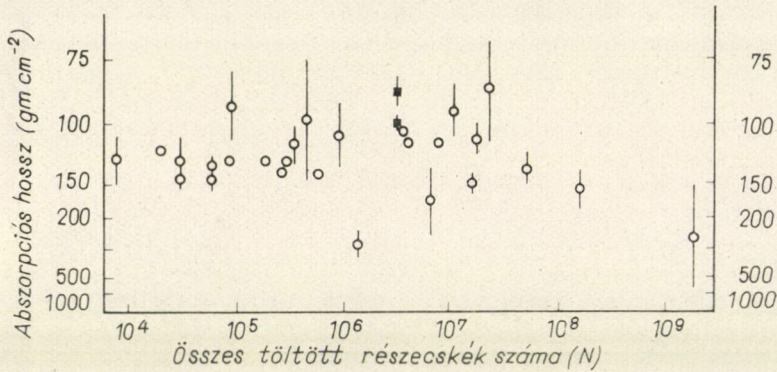
d) A rugalmatlansági tényezőre kvalitatív következtetést vonhatunk le abból a tényből, hogy a KLZ-ok elektron-foton komponensének sűrűsége nem laposodik el a tengely közelében, gyakran még 10 cm-nyire a tengelytől sem zérus a sűrűséggradiens. Mivel az elektron-foton komponensben általában sokkal kisebb az egy részecskére koncentrált energia, mint a magaktív komponensben, ezért az említett esetek nagy valószínűséggel szólnak a mellett, hogy a KLZ tengelyében egy vagy legalábbis igen kevés számú magaktív részecske hordozza a primer energia tekintélyes részét (vö. [18]).

Félig kvantitatív eredményt nyerhetünk a rugalmatlansági tényező (K) értékére a nagyenergiájú primer részek átlagos szabad úthosszával ($\lambda_c \approx 80 \text{ gcm}^{-2}$) és a KLZ-ok abszorpciós hosszának ($\lambda_a \approx 120 \text{ gcm}^{-2}$) összehasonlításával [39]:

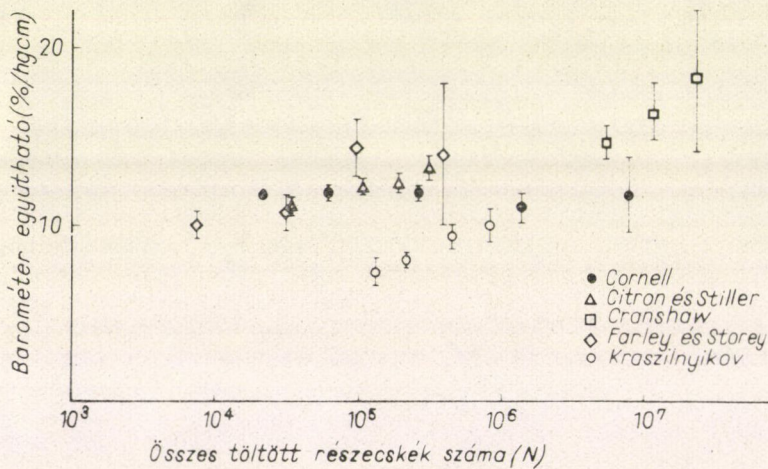
$$\lambda_a [1 - (1 - K)^\gamma] = \lambda_c,$$

ahol $\gamma \approx 1,8$ a primer részek integrális energiaspektrumának kitevője. Ebből az összefüggésből $K \approx 0,45$, megegyezésben a kisebb energiákon észlelt értékekkel. λ_a értékét mintegy 10^{17} eV primer energiáig mérték és nagyjából állandónak találták.

λ_a meghatározható a KLZ-ok zenitszögeloszlásából és barométereffektusából is. A zenitszögeloszlás módszerével végzett mérések végeredményeit a 2. ábra tünteti fel ([40] alapján, kiegészítve a [41] méréssel), a barométeregyütthatók mérési eredményei (ugyancsak [40] alapján) a 3. ábrán láthatók.



2. ábra: A KLZ-ok abszorpciós hosszának függése a záport alkotó összes töltött részecskék számától



3. ábra A KLZ-ok barométer-együtthatójának függése a záport alkotó összes töltött részecskék számától

λ_c értékének mérése (l. a hatáskeresztmetszetről mondottakat) mintegy 10^{16} eV-ig terjedt. Tehát K értékének durva állandóságát körülbelül 10^{16} eV-ig tekinthetjük igazoltnak.

Felső határt állapíthatunk meg K értékére abból a tényből, hogy 10^{15} eV primer energiájú KLZ-okban találtak 10^{12} eV energiájú magaktív részecskéket [37]. Az észlelés 3680 m magasságban, tehát mintegy 10 ütközési szabad úthossznyi atmoszférikus mélységben történt, ezért

$$10^{12} \lesssim 10^{15}(1 - K)^{10},$$

honnan

$$K \lesssim 0,5$$

meg egyezésben K értékének többi becslésével.

Az itt ismertetett KLZ-jelenségek tehát arra mutatnak, hogy az elemi kölcsönhatás hatáskeresztmetszetében, rugalmatlansági tényezőjében, a szekunder részek anizotrópiájában, transzverzális impulzusában mintegy 10^{16} eV-ig nem következik be lényeges változás.

5. A KLZ-ok számspektruma és sűrűségpektruma. Célkitűzés

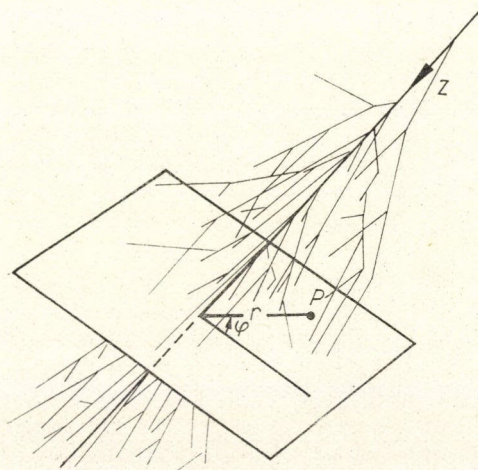
Vezessünk be hengerkoordinátákat: z, r, φ . A z tengely essék egybe a primer rész beérkezésének irányával (tehát általában nem függőleges). Ezt az irányt nevezzük a KLZ tengelyének, r pedig az úgynevezett „tengelytávolság” (4. ábra). A z tengelyen a kezdőpontot az atmoszféra tetején jelöljük ki. z -t magát gcm^{-2} egységekben mérjük és atmoszférikus mélységnek nevezzük.

Jelöljük $N(z)$ -vel a zápor „összrészecskeszámát” a z síkban, vagyis a z síkon áthaladó összes ionizáló részek számát, az illető zápor lefutása alkalmával. Legyen továbbá $\Delta(z, r, \varphi)$ a zápor „sűrűsége” a $P(z, r, \varphi)$ pontban, vagyis a P pontban a z tengelyre merőleges egységnyi felületen áthaladó részek száma, az illető zápor lefutásakor. Természetesen

$$N(z) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \Delta(z, r, \varphi) r dr d\varphi \cong 2\pi \int_0^{\infty} \Delta(z, r) r dr, \quad (2)$$

ugyanis $\langle \Delta(z, r, \varphi) \rangle$ — eltekintve a geomágneses tér okozta igen kicsi aszimmetriától [42] — nem függ a φ -től.

$N(z)$ és $\Delta(z, r, \varphi)$ sztochasztikus változók abban az értelemben, hogy adott



4. ábra A (2) egyenlet koordinátarendszere

(energiájú, természetű, irányú, stb.) primer részecske és adott összetételű kölcsönható közeg nem határozzák meg egyértelműen $N(z)$ -t és $\Delta(z, r, \varphi)$ -t, hanem ezeknek a mennyiségeknek csupán statisztikus eloszlásfüggvényeit. Fizikai szempontból elsősorban ezeknek az eloszlásfüggvényeknek a centrális momentumai (elsősorban várható értékük és szórásuk) fontosak. Ezek meghatározása a kaszkádmélet feladata. A számításokat elektron-foton kaszkádok esetére igen részletesen és tekintélyes pontossággal végrehajtották már. (L. pl. [43—45]). A KLZ-okban azonban a magaktív komponens lényeges szerepet játszik, tiszta elektromágneses kaszkád helyett a jóval bonyolultabb magaktív-elektromágneses

kaszkád formuláinak kidolgozására volna szükség. E téren eddig csak kezdeti próbálkozások történtek. [46—53].

Célszerű külön-külön definiálni a KLZ egyes ionizáló komponenseinek (lágy komponens = elektronok (e); áthatoló komponens (a) = müonok (μ) + magaktív részek (M)) összrészecskeszámát és sűrűségét:

$$\begin{aligned} N &= N_e + N'_a, & N'_a &= N_\mu + N_M \\ \Delta &= \Delta_e + \Delta'_a, & \Delta'_a &= \Delta_\mu + \Delta_M. \end{aligned}$$

A záportengely közelében a részecskék 98—99%-a elektron [54], tehát ott jó közelítéssel $\Delta \approx \Delta_e$. A záportengelytől nagy távolságban azonban $\Delta'_a \approx \Delta_e$, sőt $\Delta'_a > \Delta_e$ is lehetséges. Az összrészecskeszámnak körülbelül 90%-át teszik ki az elektronok [54].

A KLZ-ok számspektrumán, $G(z, N)dNdx dy$, értjük azon záporok időegységre eső számának várható értékét, amelyek összrészecskeszáma az észlelés síkjában N és $N + dN$ közé esik, s amelyek tengelye az észlelés síkját (x, y) pont körüli $dx dy$ nagyságú területen belül dőfi át. Az (x, y) koordinátarendszer kezdőpontja az észlelés síkjának tetszőleges pontja.

A mérések tanúsága szerint jó közelítéssel

$$G(z, N) = N_0(z) \cdot N^{-\gamma-1} \quad (3)$$

ahol γ lassan változó függvénye z -nek is és N -nek is.

$G(z, N)$ közvetlen méréséhez ismerni kell a záporok oldalszerkezetét, vagyis a $\Delta(z, r)$ sűrűségeloszlást. $\Delta(z, r)$ meghatározása csak az utóbbi években vált lehetségessé, egyedi záporok vizsgálatára alkalmas, óriási méretű berendezésekkel [9], [20b, [55].

Ha a $\Delta(z, r)$ függvény menete nem ismeretes, akkor első közelítésként — fel lehet tételezni, hogy „téglalap alakú”, vagyis

$$\Delta(r) = \Delta_{\text{átl}} = \text{konst}, \quad \text{ha } r \leq r_{\text{átl}} \quad (4)$$

és

$$\Delta(r) = 0, \quad \text{ha } r > r_{\text{átl}}.$$

$\Delta_{\text{átl}}$ és $r_{\text{átl}}$ definíciója minden észlelőberendezés-típusnál más és más; ezért a végeredmények is általában valamelyest függnek az észlelőberendezés sajátosságaitól.

$\Delta_{\text{átl}}$ segítségével definiálhatjuk a KLZ-ok sűrűség spektrumát ($H(z, \Delta)d\Delta$): ezen a szóban forgó berendezést megszólaltató Δ és $\Delta + d\Delta$ közé eső átlagos sűrűségű záporok időegységenkénti számának várható értékét értjük. Itt is jó közelítéssel fennáll, hogy a spektrum hatványfüggvény alakú:

$$H(z, \Delta) = H_0(z) \Delta^{-\gamma^*-1}, \quad (5)$$

ahol γ^* lassan változó függvénye z -nek is és Δ -nak is, azonkívül magától az észlelőberendezéstől (méreteitől, a mérési módszertől) is függ.

Egyértelmű fizikai jelentése a számspektrumnak van. A sűrűség spektrum csak akkor lenne jól meghatározott fogalom, ha a záporok átlagsűrűsége egyértelműen meghatározott mennyiség lenne. Azonban minden észlelő berendezés másképpen átlagol. A sűrűség spektrum történetileg kialakult fogalom: addig, amíg a záporok oldalszerkezetéről nem voltak ismereteink, jobb híján a számspektrum közelítésére szolgált. A záporok oldalszerkezetét ma már elég jól ismerjük, a számspektrum mérése nem jelent elvi nehézséget. A sűrűség spektrum fogalma ennek ellenére

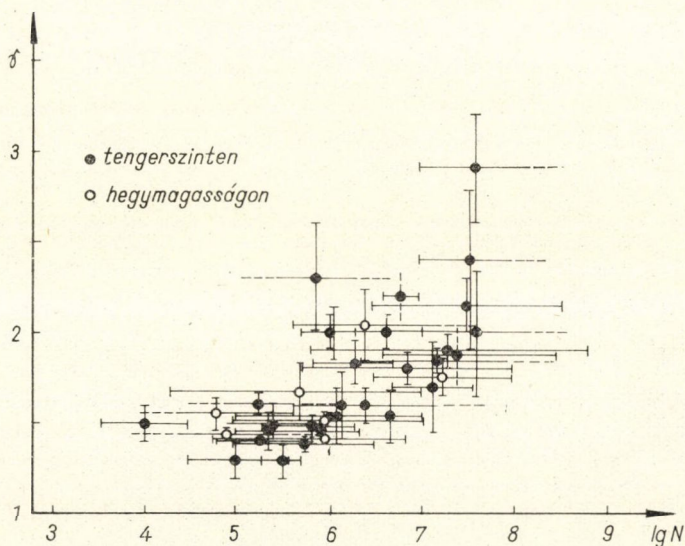
még ma is használatos, két oknál fogva. Először és legelsősorban azért, mert mérése jóval egyszerűbb eszközökkel végrehajtható, mint az óriás-berendezéseket igénylő számspektrum-mérés. Másodszor azért, mert alakja — bizonyos esetekben — igen jó közelítéssel egyezik a számspektrum alakjával. Minden egyes sűrűség spektrum-mérés esetében külön megvizsgálandó azonban, hogy a mérés eredményeként nyert spektrum mennyire tér el a számspektrumtól.

γ , ill. γ^* értéke függ a primer kozmikus sugárzás energia- és töltés szerinti összetételétől, valamint az elemi kölcsönhatások természetétől (hatáskeresztmetszetétől, a keletkező szekunder részek természetétől, számától, impulzus szerinti eloszlásától, stb.). Ha γ (ill. γ^*) értéke szignifikánsan függ N (ill. Δ_{atl}) értékétől, akkor ez arra mutat, hogy vagy a primer sugárzás összetétele, vagy az elemi kölcsönhatások természete függvénye az energiának.

Az eddig végzett (1947 és 1964 között publikált) γ (ill. γ^*) mérések végeredményét a mérési tartomány függvényében az 1. táblázat, ill. az 5. ábra tünteti fel. A részecskeszám-tartományokat a

$$\Delta_{\text{atl}} = N/r_0^2 \pi$$

formulával számítottuk át sűrűségtartományokba, ahol $r_0 \approx 56\,000/z$ m a KLZ elektronjainak átlagos oldalirányú szóródása z gcm⁻² atmoszférikus mélységben [56].



5. ábra Az 1947 és 1964 között végzett számspektrum- és sűrűség spektrum-mérések eredményei

Az eredményekből megállapítható, hogy γ ill. γ^* elég tág határokon belül független a tengerszintfeletti magasságtól [57]. Az intenzitáskonstansok (G_0 , ill. H_0) erősen függenek ugyan z -től, azonban mérésük csak meglehetősen nagy hibával lehetséges (sokkal nagyobb relatív hibával, mint γ ill. γ^* mérése). Ezen túlmenően, legalábbis a KLZ vizsgálatoknál szokásos nagy z értékek ($z = 15 \div 25$ kaszkád-egység) mellett, kevésbé is érzékenyek az elemi kölcsönhatások paramétereire

I. TÁBLÁZAT

Az 1947 és 1964 között publikált sűrűség- és számspektrummérések eredményei
(A táblázat a tengerszinten és hegymagasságon
abszorbens nélkül végzett mérések eredményeit tünteti fel.)

A $N \gtrsim 3 \cdot 10^6$

Sor- szám	N	Δ	Mérési módszer	Tengerszint feletti magasság	γ	Szerzők
	részecskeszám	sűrűség (m^{-2})		m		
1	($\approx 10^7$)	≈ 1100	K	< 100	$2,9 \pm 0,3$	[61]
2	($\approx 10^7$)	≈ 1000	Io	< 100	$2,4 \pm 0,4$	[62]
3	($5 \cdot 10^6 - 10^7$)	500–1000	Pr	< 100	$2,2 \pm ?$	[63]
4	$3 \cdot 10^6 - 3 \cdot 10^8$	—	GM, fv	200	$2,15 \pm 0,15$	[55a]
5	$2 \cdot 10^6 - 10^7$	—	N, GM	200	$2,0 \pm 0,1$	[64]
6	$\approx 10^7$	—	N, GM	200	$2,0 \pm 0,35$	[65]
7	$7 \cdot 10^5 - 7 \cdot 10^8$	—	N, Sz	< 100	$1,90 \pm 0,10$	[66]
8	$3 \cdot 10^6 - 3 \cdot 10^8$	—	N, GM	< 100	$1,88 \pm ?$	[16]
9	$\approx 6 \cdot 10^6$	—	N, Sz	260	$1,84 \pm 0,06$	[67]
10	$5 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^8$	—	N, Sz	< 100	$1,8 \pm 0,1$	[68]
11	($3 \cdot 10^6 - 10^8$)	100–5000	GM, fv	3860	$1,76 \pm 0,12$	[69]
12	($5 \cdot 10^6 - 4 \cdot 10^7$)	500–4000	K	410	$1,69 \pm 0,27$	[21]
13	($5 \cdot 10^6 - 10^7$)	500–1000	Io	< 100	$1,54 \pm 0,14^{**}$	[62]

* A sűrűségtartomány a statisztikus fluktuációk figyelembevételével van számítva, ellentétben a többi méréseknel szereplő adatokkal. Statisztikus fluktuációk elhanyagolásával $800 < \Delta < 13\,000$ adódik.

** E mérés szerint a spektrum „törése” $\Delta = 1000$ rész m^{-2} -nél van (vö. 2. sor)

B

 $10^5 \lesssim N \lesssim 5 \cdot 10^6$

Sor- szám	N	Δ	Mérési módszer	Tengerszint feletti magasság	γ	Szerzők
	részecskeszám	sűrűség (m^{-2})		m		
1	$\approx 8 \cdot 10^5$	—	Cs	< 100	$2,3 \pm 0,3$	[70]
2	$\approx 4 \cdot 10^5$	—	GM, h	2770	$2,04 \pm 0,2$	[38]
3	$5 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^6$	—	N, Sz	200	$2,0 \pm 0,1$	[64]
4	$5 \cdot 10^5 - 3 \cdot 10^6$	—	Cs	< 100	$2,0 \pm 0,15$	[71]
5	($7 \cdot 10^5 - 6 \cdot 10^6$)	70–600	K	410	$1,83 \pm 0,13$	[21]
6	$2 \cdot 10^4 - 1,3 \cdot 10^7$	—	N, GM + Cs	3860	$1,67 \pm 0,15$	[72]
7	($5 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^6$)	50–500	K	< 100	$1,6 \pm 0,2$	[61]
8	$\approx 3,5 \cdot 10^5$	—	Sz	< 100	$1,6 \pm 0,1$	[73]
9	$10^5 - 10^7$	—	Sz	1575	$1,54 \pm 0,006$	[74]
10	($2 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^7$)	20–2000	GM, h + Io	< 100	$1,54 \pm 0,16$	[75]
11	($10^5 - 10^7$)	3–300	GM, fv	4800	$1,52 \pm 0,04$	[78]
12	($2 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^6$)	20–200	K	410	$1,48 \pm 0,07$	[21]
13	($5 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^6$)	50–500	GM, fv	< 100	$1,445 \pm 0,014$	[79]
14	($8 \cdot 10^4 - 8 \cdot 10^6$)	3–300	GM, fv	3860	$1,42 \pm 0,02$	[78]
15	($10^5 - 10^6$)	10–100	GM, fv	410	$1,41 \pm 0,01$	[80]
16	($2 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^6$)	20–500	Pr	< 100	$1,39 \pm 0,04$	[63]

C

$$N \lesssim 5 \cdot 10^5$$

Sor-szám	N	Δ	Mérési módszer	Tengerszint feletti magasság	γ	Szerzők
	részecskeszám	sűrűség (m^{-2})		m		
1	$\sim 2 \cdot 10^5$	—	Cs+Ne, h	< 100	$1,61 \pm 0,05$	[70]
2	$\lesssim 4 \cdot 10^5$	—	GM+Ne, h+K	2770	$1,55 \pm 0,10$	[38]
3	$3 \cdot 10^3 - 3 \cdot 10^4$	—	N, Sz	< 100	$1,5 \pm 0,1$	[81]
4	$8 \cdot 10^4 - 8 \cdot 10^5$	—	GM, h	200	$1,5 \pm 0,1$	[82]
5	$\sim 7,5 \cdot 10^4$	—	GM, h	3260	$1,45 \pm 0,03$	[83]
6	$\sim 7,5 \cdot 10^4$	—	GM, h	4300	$1,48 \pm 0,04$	[83]
7	$\sim 7,5 \cdot 10^4$	—	GM, h	5200	$1,52 \pm 0,04$	[83]
8	$10^5 - 3 \cdot 10^5$	—	N, GM	200	$1,45 \pm 0,1$	[64]
9	$3 \cdot 10^4 - 3 \cdot 10^5$	—	N, Sz	< 100	$1,3 \pm 0,1$	[68]
10	$2 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^5$	—	Cs	< 100	$1,3 \pm 0,1$	[71]

RÖVIDÍTÉSEK JEGYZÉKE:

GM, fv	GM csöves, felületváltoztatásos módszer
GM, h	GM csöves, hodoszkópos módszer
Ne, h	Neoncsöves hodoszkóp
Sz	Szcintillációs számláló
Cs	Cserenkov számláló
K	Ködkamra
Io	Ionizációs kamra
Pr	Proporcionális számláló
N, GM	Közvetlen számspektrummérés GM csövekkel
N, Sz	Közvetlen számspektrummérés szcintillációs számlálókkal

és a primer sugárzás összetételére, mint a spektrumok kitevői. Az intenzitáskonstansok mérésére tehát a továbbiakban nem fogunk különösebb figyelmet fordítani és a spektrumokat is csak egyetlen tengerszintfeletti magasságban — közelítőleg tengerszinten — fogjuk vizsgálni.

Megállapítható továbbá az eddigi mérésekből (s ezt már sokan kiemelték eddig is), hogy a γ (ill. γ^*) kitevő nem állandó, hanem a N (ill. Δ_{atl}) növekedtével lassan (nagyjából logaritmikusan, l. pl. [58—60]) nő. Ez a lassú növekedés magyarázható a primer sugárzás energia szerinti összetételének lassú változásával: más (nem KLZ) mérések is megerősítik, hogy az integrális primer energiaspektrum kitevője 1,4-ről kb 1,9-re nő, amint az energia 10^{10} eV-ről mintegy 10^{15} eV-ra nő [66].

Külön figyelmet érdemel néhány újabb mérés, amely szerint a KLZ-ok sűrűség-spektrum-kitevőjének *lassú* növekedése csak mintegy $\Delta_{\text{atl}} \approx 500$ részecske/ m^2 -ig tart, utána γ^* *hirtelen* megnő (spektrum „letörik” nagy sűrűségeken) [61, 62, 63]. A legnagyobb változást Reid, Gopaulsingh, Page, Idnurm, McCusker, Malos, Millar, Winterton találta ködkamrával végzett méréssel [61]; szerintük

$$\gamma^* = 1,5 \quad \text{ha} \quad \Delta_{\text{atl}} < 500 \text{ részecske}/m^2$$

és

$$\gamma^* = 2,9 \pm 0,3 \quad \text{ha} \quad \Delta_{\text{atl}} > 1100 \text{ részecske}/m^2.$$

(A [61] cikkben $\gamma^* = 2,9 \pm 0,5$ szerepel, azonban a 0,5 adat nem a standard hiba. A mérésre és a hiba számítására a III. 6. részben visszatérünk.)

A [61, 62, 63] mérések mind ún. sűrűségbecslő módszerekkel (I. II. 2. B. rész) végrehajtott *sűrűség spektrum*-mérések. Eredményük szignifikánsan eltér a GM csöves és szcintillációs módszerekkel ugyanebben a sűrűségtartományban nyert közvetlen számspektrum-mérések eredményétől ([64—68] mérések átlaga: $\gamma = 1,87 \pm 0,04$). A II és IV. részben részletesen kifejtett gondolatmenetek szerint ebből az következik, hogy a KLZ-ok oldalszerkezete nagy részecskeszámok (nagy primer energiák) esetén élesen megváltozik, ami az elemi kölcsönhatás természetében — elsősorban a szekunder részek impulzuseloszlásában (irányeloszlásában) — bekövetkezett változásra mutat.

Elvi jelentőségű kérdés eldöntéséről van tehát szó. Ezért feltétlenül olyan új mérés elvégzésére volt szükség, amelynek körülményei jól meghatározottak és az eredmények egyértelmű értelmezését teszik lehetővé.

Ilyen mérést hajtottunk végre a Központi Fizikai Kutatóintézet Kozmikus Sugárzási Laboratóriumában. Dolgozatomban ezzel a méréssel s eredményeinek értelmezésével foglalkozom. Kimutatom, hogy γ (ill. γ^*) értéke — legalábbis $\Delta_{\text{atl}} \approx \approx 4000$ részecske/m² sűrűségéig — nem mutat hirtelen növekedést (a spektrum nem „törik le”), pontosabban szólva: a mérés eredményeként kapott $\gamma = 1,69 \pm 0,27$ érték a statisztikus hiba határain belül megegyezik a logaritmikus növekedést figyelembevevő [60] formula alapján számított $\gamma = 1,58$ értékkel és a [64—68] mérések átlagaként nyert $\gamma = 1,87 \pm 0,04$ értékkel is. Tehát a KLZ-ok sűrűség spektrumának [61, 62, 63]-ban talált törése *nem áll fenn*. A IV. fejezetben foglalkozom azokkal a következtetésekkel, amelyeket ebből az eredményből az elemi kölcsönhatás természetére vonatkozóan le lehet vonni.

Mielőtt a mérés ismertetésére (III. fejezet) rátérnék, részletesen foglalkozni kell a mérési módszerekkel (II. fejezet). A számspektrum és a sűrűség spektrum mérési módszerei sok olyan elvi kérdést vetnek fel, amelyeket a megfelelő módszer kiválasztásánál figyelembe kell venni. Ezeknek a kérdéseknek egy része (pl. γ és γ^* eltérése, ennek becslési lehetősége, a telített GM csövekkel vezérelt ködkamra előnyei, stb.) a szakirodalomban nincsen világosan megfogalmazva. Szükséges tehát, hogy ezekkel a kérdésekkel ezen a helyen valamivel részletesebben foglalkozunk.

II. A kiterjedt légizáporok számspektrumának és sűrűség spektrumának mérési módszerei

1. A számspektrum közvetlen mérése

Nagy (több km²-nyi) területen szétszórt több (legalább tíz-húsz) nagyfelületű (egyenként legalább néhány m²) észlelőberendezéssel külön-külön mérjük minden egyes beérkező KLZ sűrűségét minden egyes észlelőfelület helyén. Ilymódon, minden egyes KLZ sűrűségeloszlásnak $\Delta(r)$ megállapítása céljából legalább tíz-húsz mérési pont áll rendelkezésre. A mérési pontokra elméleti úton megindokolható alakú görbét feszítünk, vagyis (pl. a legnagyobb valószínűség módszerével) megállapítjuk az elméleti alakban szereplő konstansok becsült értékét. (E konstansok között szerepel természetesen a záportengely dőfspontjának két koordinátája is.) Az ily módon megállapított sűrűségeloszlást az egész síkra integrálva megállapítható

külön-külön minden egyes KLZ összrészecskeszáma. Az összrészecskeszámok hisztogrammjából a számspektrum alakja meghatározható. (Természetesen figyelembe kell venni, hogy a berendezés különböző összrészecskeszámú záporokra más és más valószínűséggel szólal meg.)

Az eddigi közvetlen számspektrum-mérések [64—68] [72] mind ezt a kiértékelési eljárást követték. A kiértékelésnek ez a módja azonban önkényesen szétválasztja a $\Delta(r)$ és a $G(N)$ függvényekben szereplő paraméterek meghatározását: ez a paraméterbecslések hibáinak eltorzítására vezet (kivéve, ha a korrelációs mátrix szeparábilis, ez azonban a jelen esetben alagha állhat fenn). A számspektrum-mérés szempontjából még nagyobb hátrányt jelent az a körülmény, hogy a fent leírt eljárással minden egyes zápor dőféspontjának koordinátáit meg kell határozni, ami a számspektrum-mérés szempontjából teljesen felesleges és elkerülhető. ($\Delta(r)$ paramétereinek meghatározása is felesleges, ha a számspektrumot keressük, de nem kerülhető el.)

A számspektrum közvetlen mérési módszeréhez kapcsolódó legjobb matematikai statisztikai eljárás tehát még kidolgozásra vár.

A számspektrum fent leírt közvetlen mérési módszere kétségtelenül a legjobb abból a szempontból, hogy a legkevesebb elméleti feltevésre támaszkodik. Teljesítő-képessége messze túlmege a számspektrum meghatározásán; az elmondottakból azonnal következik, hogy a záporok oldalszerkezetének megállapítására és az oldalszerkezet fluktuációinak vizsgálatára is alkalmas. A módszer alkalmazásához szükséges berendezés azonban rendkívül költséges és munkaigényes. Amennyiben pusztán a számspektrum meghatározása a cél, ez sokkal egyszerűbb eszközökkel is megvalósítható (I. II. 3. részt).

2. A sűrűségpektrum mérése

Nézzük most az ellenkező véletet, vagyis tegyük fel, hogy a sűrűségeloszlás téglalap-alakú (4) és határozzuk meg ennek alapján a $H(\Delta)$ sűrűségpektrum alakját. Az alkalmazott módszerek két csoportba sorolhatók: A) kioldó számlálós (GM cső, szcintillációs detektor, Cserenkov-detektor, neon-villanócső) módszerek B) sűrűségbecslő (impulzus-ionizációs kamra, proporcionális számláló, szcintillációs számláló, Cserenkov számláló, ködkamra, szikrakamra) módszerek. Természetesen az A) és B) módszerek kombinálhatók.

A) Kioldó számlálós módszerek

A kioldó számlálókat az jellemzi, hogy a számláló szolgáltatja feszültség-impulzusból nem lehet a számlálón áthaladó (az impulzust kiváltó) részecskék számára, természetére következtetni. A kioldó számlálókkal háromféleképpen lehet a sűrűségpektrumot meghatározni: a) a koincidenca-rendszám változtatásával, b) az észlelő felület nagyságának változtatásával és c) hodoszkópos módszerrel.

a) A koincidenencia-rendszám változtatása

A méréshez $k+1$ számú detektort használunk, érzékeny felületüket jelöljük $S_1, S_2, \dots, S_k, S_{k+1}$ -el. Megmérjük azoknak a koincidenenciáknak óránkénti számát (C_k), amelyeknek az 1., 2., ..., k -ik detektor megszólalásából állnak (tekintet nélkül arra, hogy a $k+1$ -ik detektor megszólalt-e vagy sem). Megmérjük továbbá a $k+1$ -edrendű koincidenenciák óránkénti számát (C_{k+1}). Feltételezve, hogy a sűrűségspektrum (5) alakú, a C_k/C_{k+1} hányadosból γ^* kiszámítható, a következő megfontolások alapján:

Annak a valószínűsége, hogy egy Δ átlagsűrűségű zápor detektálásakor az S_i felületű detektorra legalább egy részecske essék: $1 - e^{-S_i \Delta}$; annak a valószínűsége, hogy az S_1, S_2, \dots, S_k felületű detektorok mindegyikére legalább egy részecske essék: $\prod_{i=1}^k (1 - e^{-S_i \Delta})$. A $\Delta, \Delta + d\Delta$ intervallumba eső átlagsűrűségű záporok óránkénti számának várható értéke $H(\Delta)d\Delta = H_0 \Delta^{-\gamma^*-1} d\Delta$ (l. (5)), tehát az S_1, \dots, S_k felületű detektorok koincidenenciáinak óránkénti száma, várható értékben

$$\langle C_k \rangle = \int_0^\infty H_0 \Delta^{-\gamma^*-1} \prod_{i=1}^k (1 - e^{-S_i \Delta}) d\Delta. \quad (6)$$

Hasonlóképpen

$$\langle C_{k+1} \rangle = \int_0^\infty H_0 \Delta^{-\gamma^*-1} \prod_{i=1}^{k+1} (1 - e^{-S_i \Delta}) d\Delta. \quad (7)$$

A $\langle C_k \rangle$ típusú integrálok konvergensek, ha $0 < \gamma^* < k$, explicit alakjuk Jánossy és Broadbent [84] szerint nem egészszámú γ^* esetén

$$\begin{aligned} \langle C_k \rangle = & H_0 (-\gamma^* - 1)! \left[- \sum_i S_i^{\gamma^*} + \sum_{i_1, i_2} (S_{i_1} + S_{i_2})^{\gamma^*} - \right. \\ & \left. - \sum_{i_1, i_2, i_3} (S_{i_1} + S_{i_2} + S_{i_3})^{\gamma^*} + \dots + (-1)^k (S_1 + S_2 + \dots + S_k)^{\gamma^*} \right], \end{aligned} \quad (8)$$

míg egészszámú γ^* esetén [85]

$$\begin{aligned} \langle C_k \rangle = & (-1)^{\gamma^*+1} H_0 \frac{1}{\gamma^*!} \frac{d}{d\gamma^*} \left[- \sum_i S_i^{\gamma^*} + \sum_{i_1, i_2} (S_{i_1} + S_{i_2})^{\gamma^*} - \right. \\ & \left. - \sum_{i_1, i_2, i_3} (S_{i_1} + S_{i_2} + S_{i_3})^{\gamma^*} + \dots + (-1)^k (S_1 + S_2 + \dots + S_k)^{\gamma^*} \right], \end{aligned} \quad (8a)$$

ahol a \sum_{i_1, i_2} összegzés kiterjeszthető az 1, 2, ..., k elemek összes másodrendű kombinációira, a \sum_{i_1, i_2, i_3} összegezés az összes harmadrendű kombinációkra, s.í.t. $\langle C_k \rangle$ és $\langle C_{k+1} \rangle$ hányadosát γ^* függvényében táblázatba foglalva, a

$$\frac{\langle C_k \rangle}{\langle C_{k+1} \rangle} = \frac{C_k}{C_{k+1}}$$

egyenletből γ^* becsült értéke meghatározható.

Például $k=3$ és $S_1=S_2=S_3=S_4 (=S)$ esetében

$$\frac{\langle C_3 \rangle}{\langle C_4 \rangle} = \frac{-3 + 3 \cdot 2^{\gamma^*} - 3^{\gamma^*}}{-4 + 6 \cdot 2^{\gamma^*} - 4 \cdot 3^{\gamma^*} + 4^{\gamma^*}}, \quad (9)$$

ill. egészszámú γ^* esetén

$$\frac{\langle C_3 \rangle}{\langle C_4 \rangle} = \frac{3 \cdot 2^{\gamma^*} \ln 2 - 3^{\gamma^*} \ln 3}{6 \cdot 2^{\gamma^*} \ln 2 - 4 \cdot 3^{\gamma^*} \ln 3 + 4^{\gamma^*} \ln 4}. \quad (9a)$$

Ez a módszer egyike a legrégebbieknek. Hamar kiderült azonban, hogy meglehetősen érzékeny az észlelőberendezés adataira, általában túlságosan nagy γ^* értéket ad. A módszert ma már nem alkalmazzák, a 2. ábrába (1. táblázatba) nem vettem fel a vele mért értékeket.

b) Az észlelőfelület nagyságának változtatása

A méréshez k számú detektort használunk, érzékeny felületüket jelölje ismét S_1, S_2, \dots, S_k és mérjük a k -adrendű koincidenciák számát: C_k . Változtassuk néhány (tetszőszerinti számú) detektor felületét, például S_1 és S_2 -ét, mérjük meg a $C_k(S_1, S_2)$ függvény értékét néhány pontban. E mérési adatok és a (8) kifejezés segítségével a H_0 és γ^* állandók becsült értékei meghatározhatók. A módszer lehetőséget nyújt a sűrűség spektrum alakjára tett feltevés (5) ellenőrzésére is.

Néhány kiragadott észlelőfelület nagyságának tetszőszerinti változtatása helyett célszerűbb valamennyi észlelőfelület nagyságának változtatása, arányuk állandóan tartásával. Vagyis legyen

$$S_i = \alpha s_i \quad (i = 1, 2, \dots, k)$$

ahol az s_i -k a mérés folyamán állandók és csak az α értéke változik. (8) alapján ebben az esetben

$$\langle C_k(\alpha) \rangle = A^* \cdot \alpha^{\gamma^*}, \quad (10)$$

ahol A^* a mérés folyamán állandó, értéke nem egészszámú γ^* esetén

$$A^* = H_0(-\gamma^* - 1)! \left[- \sum_i s_i^{\gamma^*} + \sum_{i_1, i_2} (s_{i_1} + s_{i_2})^{\gamma^*} - \sum_{i_1, i_2, i_3} (s_{i_1} + s_{i_2} + s_{i_3})^{\gamma^*} + \dots + (-1)^k (s_1 + s_2 + \dots + s_k)^{\gamma^*} \right], \quad (11)$$

míg egészszámú γ^* esetén

$$A^* = (-1)^{\gamma^*+1} H_0 \frac{1}{\gamma^*!} \frac{d}{d\gamma^*} \left[- \sum_i s_i^{\gamma^*} + \sum_{i_1, i_2} (s_{i_1} + s_{i_2})^{\gamma^*} - \sum_{i_1, i_2, i_3} (s_{i_1} + s_{i_2} + s_{i_3})^{\gamma^*} + \dots + (-1)^k (s_1 + s_2 + \dots + s_k)^{\gamma^*} \right]. \quad (11a)$$

E módszer speciális esetét kapjuk, ha valamennyi észlelőfelület nagyságát egyenlőnek választjuk:

$$S_1 = S_2 = \dots = S_k = S.$$

Ekkor

$$\langle C_k(S) \rangle = A^{**} \cdot S^{\gamma^*} \quad (10a)$$

ahol

$$A^{**} = (-\gamma^* - 1)! H_0 \left[-\binom{k}{1} + \binom{k}{2} 2^{\gamma^*} - \dots + (-1)^k \binom{k}{k} k^{\gamma^*} \right], \quad (12)$$

ill.

$$A^{**} = (-1)^{\gamma^*+1} H_0 \frac{1}{\gamma^*!} \left[\binom{k}{2} 2^{\gamma^*} \ln 2 - \binom{k}{3} 3^{\gamma^*} \ln 3 + \dots + (-1)^k k^{\gamma^*} \ln k \right]. \quad (12a)$$

A (10), ill. (10a) összefüggésből az A^* (ill. A^{**}) és γ^* állandók becslött értékei könnyen meghatározhatók, egyúttal az (5) feltevés helyessége is ellenőrizhető.

A meghatározandó állandók azonban nem A^* (ill. A^{**}) és γ^* , hanem tulajdonképpen H_0 és γ^* . Az A^* (ill. A^{**}) értéke a H_0 -n kívül még γ^* -tól is függ. Ismeretes azonban, hogy H_0 és γ^* becslött értékét s ennek szórását nem befolyásolja lényegesen, ha maguk a H_0 , γ^* állandók helyett két olyan $\alpha_1(H_0, \gamma^*)$, $\alpha_2(H_0, \gamma^*)$ állandó értékét határozzuk meg, amelyekből H_0 és γ^* egyértelműen meghatározhatók [86]. Ezen túlmenően: a most tárgyalt sűrűség-, ill. számspektrummal kapcsolatos paramétermeghatározási problémák esetében, ha a legnagyobb valószínűség módszerét használjuk, H_0 és γ^* becslött értéke és hibájuk is pontosan ugyanaz, akár H_0 -t és γ^* -t akár A^* (ill. A^{**})-t és γ^* -t tekintjük ismeretleneknek. Ezt a III. 4. pontban egy speciális esetre be fogjuk bizonyítani. Annak mintájára a bizonyítás valamennyi esetben elvégezhető.

c) Hodoszkóp

Legyen k számú észlelő detektorunk (ún. hodoszkóp-detektorok), áttekinthetőség kedvéért legyenek valamennyien azonos érzékeny felületűek (S). Legyen ezenkívül még m számú ún. vezérlő detektorunk, felületük egyenként S' . A vezérlő detektorok m szerez koincidenciába vannak kapcsolva, koincidencia-jelüket nevezik vezérlőjelnek (master impulzusnak). Minden egyes vezérlőjel megjelenése alkalmával a berendezés önműködően jelzi, hogy a hodoszkóp-detektorok közül melyiken haladt át (legalább egy) részecske és melyiken nem haladt át részecske. Az előbbieket száma legyen n , utóbbiaké $k - n$. Azoknak a KLZ-oknak az óránkénti száma, amelyek mind az m vezérlő detektort, továbbá n darab hodoszkóp-detektort megszólaltatnak és $k - n$ számú hodoszkóp-detektort nem szólaltatnak meg, várható értékben:

$$\langle C(m; k, n) \rangle = \binom{k}{n} \int_0^\infty H_0 \Delta^{-\gamma^*-1} (1 - e^{-S' \Delta})^m (1 - e^{-S \Delta})^n e^{-S \Delta (k-n)} d\Delta. \quad (13)$$

(13) jobboldalát a Jánossy—Broadbent módszerrel [84] ill. annak egész számú γ^* -ra való kiterjesztésével [85] explicite felírhatjuk.

$$\langle C(m; k, n) \rangle = \binom{k}{n} H_0 w(m; k, n), \quad (14)$$

ahol

$$w(m; k, n) = (-\gamma^* - 1)! \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n (-1)^{i+j} \binom{m}{i} \binom{n}{j} [iS' + (k - n + j)S]^{\gamma^*}, \quad (15)$$

ha γ^* nem egész szám és

$$w(m; k, n) = (-1)^{\gamma^*+1} \frac{1}{\gamma^*!} \frac{d}{d\gamma^*} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n (-1)^{i+j} \binom{m}{i} \binom{n}{j} [iS' + (k-n+j)S]^{\gamma^*}, \quad (15a)$$

ha γ^* egész szám.

$m=C$ és $n=k$ esetében (13) átmegy (10a)-ba és (15), ill. (15a) átmegy (12), ill. (12a)-ba. Az összes lehetséges n -ekre mérve a $(m; k, n)$ óráatlagokat a $\langle C(m; k, n) \rangle$ kifejezésekkel való összehasonlítás (a legnagyobb valószínűség módszere) alapján H_0 és γ^* becslült értéke megállapítható. Ez a módszer is általában érzékeny az észlelőberendezés sajátságaira, a berendezés geometriai méreteinek megfelelő megválasztásával ez a függés minimálisra csökkenthető (I. a II. 3. C. végén tett megjegyzést).

B) Sűrűségbecslő módszerek

Az impulzus-ionizációs kamra, a proporcionális számláló, a szcintillációs számláló, a Cserenkov-számláló, a ködkamra és a szikrakamra mindegyike alkalmas arra, hogy az általuk adott feszültégimpulzus, fényimpulzus, vagy a bennük látható nyomok száma alapján következtetni lehessen arra, hogy az adott pillanatban hány ionizáló részecske haladt át rajtuk. (A felsorolásban szereplő első négy számlálófajta esetén fel kell tételezni, hogy az áthaladó részecskék mind minimális ionizációjúak voltak. Ezeknél a detektoroknál, még minimális ionizáció mellett is, a részecskék természete is befolyásolja a teljes ionizáció mennyiségét, amelynek alapján a részecskék számának becslése történik.)

A számlálók száma legyen k , észlelő felületük nagysága rendre S_1, S_2, \dots, S_k , a rajtuk áthaladó részecskék száma egy bizonyos esetben — rendre n_1, n_2, \dots, n_k . Lehet úgy alakítani a berendezést, hogy nem kívánjuk valamennyi számláló megszólalását; a koincidencia-jel kialakításában részt nem vevő számlálókon áthaladó részecskék száma lehet zérus is. Ha a berendezés Δ átlagsűrűségű KLZ-ra szólal meg, akkor annak a valószínűsége, hogy az S_i felületű számlálókra a várható $S_i \Delta$ helyett pontosan n_i számú részecske érkezzék: $\frac{(S_i \Delta)^{n_i}}{n_i!} e^{-S_i \Delta}$. Tehát azoknak a KLZ-oknak az óránkénti száma, amelyek az S_1, S_2, \dots, S_k felületű detektorokon pontosan n_1, n_2, \dots, n_k számú részecskét küldenek át:

$$\langle C(n_1, n_2, \dots, n_k) \rangle = \int_0^\infty H_0 \Delta^{-\gamma^*-1} \prod_{i=1}^k \frac{(S_i \Delta)^{n_i}}{n_i!} e^{-S_i \Delta} d\Delta. \quad (16)$$

A jobboldali integrál konvergens, ha $\gamma^* < n_1 + n_2 + \dots + n_k$; értéke

$$\langle C(n_1, n_2, \dots, n_k) \rangle = H_0 \frac{(n_1 + n_2 + \dots + n_k - \gamma^* - 1)!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \cdot \frac{S_1^{n_1} \cdot S_2^{n_2} \cdot \dots \cdot S_k^{n_k}}{(S_1 + S_2 + \dots + S_k)^{n_1 + n_2 + \dots + n_k - \gamma^*}}$$

A mért $C(n_1, n_2, \dots, n_k)$ értékeknek $\langle C(n_1, n_2, \dots, n_k) \rangle$ -val való összehasonlításából (pl. a legnagyobb valószínűség módszerével) H_0 és γ^* becslült értéke megállapítható. A végeredmény függ az észlelőberendezés adataitól.

3. A számspektrum mérése, ha az oldalszerkezet minden záporban ugyanaz

Az óriási berendezésekkel (Moszkva, MIT, India [87—89]) végzett $\Delta(r)$ mérések arra mutattak, hogy az egyes KLZ-ok oldalszerkezete alig különbözik egymástól, első közelítésben azonosnak vehető. Ezen azt értjük, hogy bármely záporban, adott távolságban a zápor tengelyétől, a sűrűség arányos az összrészecseszámmal:

$$\Delta(r) = Nf(r), \quad (18)$$

ahol $f(r)$ minden záporra ugyanaz (tehát független N -től is), és

$$\int_0^{\infty} f(r) 2\pi r dr = 1 \quad (18a)$$

(vö. (2)). Világos, hogy (18) nem lehet szigorúan igaz, mert egy és ugyanazon zápor oldalszerkezete a zápor kifejlődése, elhalása folyamán nyilván folytonosan változik. Adott szinten különböző energiájú (különböző összrészecseszámú) záporokat észelve nyilván különböző fejlettségi fokú záporokat észlelünk, tehát ezekben $f(r)$ nem lehet pontosan ugyanaz. Amennyiben azonban nem túlságosan fiatal záporokat ($z > z_m$, ahol z_m a kaszkádmáximo mélysége, vagyis az a mélység, amelyben $N(z_m) = \text{maximum}$) és nem túlságosan öreg záporokat (E_0 , a primer rész energiája mintegy 10^{14} eV-nál nagyobb legyen) vizsgálunk, a (18)-el kifejezett állítás mégis jó közelítéssel igaz, változzék bár N több nagyságrenden át.

A (18) összefüggés módot nyújt arra, hogy az eddig ismertetett módszerek közül kikeressük azokat, amelyek nem torzítják el a számspektrumot, vagyis amelyek a sűrűségpektrum kitevőjére (γ^*) olyan becsült adatot szolgáltatnak, amely egyúttal a számspektrum kitevőjének (γ) is torzítatlan becslése.

A) Kioldó számlálós módszerek

A II. 2. A. részben tárgyalt kioldó számlálós módszerek valamennyien valamilyen $C(m; k, n)$ intenzitás mérésén alapultak ($C(m; k, n)$ azoknak az észlelt záporoknak az óraátlagát jelentette, amelyek m darab meghatározott detektort megszólaltattak s ezen kívül k darab detektorból n detektort megszólaltattak és $k - n$ -et nem). A (3) számspektrum segítségével és (18) figyelembevételével e záporok intenzitásának várható értéke a következőképpen írható fel:

$$\begin{aligned} \langle C(m; k, n) \rangle = & \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} G_0 N^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^m (1 - e^{-S_i N f_i}) \cdot \\ & \cdot \prod_{v=1}^n (1 - e^{-S_{j_v} N f_{j_v}}) \prod_{v=n+1}^k e^{-S_{j_v} N f_{j_v}} dN dx_0 dy_0 \end{aligned} \quad (19)$$

ahol

$$f'_i = f(\sqrt{(x'_i - x_0)^2 + (y'_i - y_0)^2}) \quad (i = 1, 2, \dots, m)$$

$$f_j = f(\sqrt{(x_j - x_0)^2 + (y_j - y_0)^2}) \quad (j = 1, 2, \dots, k)$$

Itt x_0, y_0 a záportengely dőféspontjának koordinátáit, x'_i, y'_i és x_j, y_j pedig az észlelőfelületek középpontjainak koordinátáit jelenti. Az összegezés kiterjesztendő az összes j_1, j_2, \dots, j_n kombinációkra, amelyek az $1, 2, \dots, k$ ($\cong n$) elemekből alkothatók. (A (19) kifejezésben nem tételeztük fel, hogy az észlelőfelületek között egyenlők is vannak.)

A (19) és a további vele analóg kifejezésekben feltételeztük, hogy a KLZ-ok sűrűsége az észlelődetektorok felületén belül állandó. Amennyiben ezt nem akarjuk feltételezni, akkor (19)-ben és a hozzá tartozó kifejezésekben az $S_i f_i$ szorzatok helyett az

$$\iint_{(S_i)} f(\sqrt{(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2}) dx_i dy_i$$

integrálok írandók, ahol az integrál a szóbanforgó észlelődetektor felületére (S_i) terjesztendő ki: dx_i, dy_i az észlelődetektor felületének egy eleme, x_i, y_i a detektorfelület egy tetszés szerinti pontjának koordinátái. Ezek az integrálok kétségkívül igen nagy pontossággal helyettesíthetők az $S_i f_i$ középértékekkel, kivéve azt az esetet, amikor a KLZ tengelye a detektor közvetlen közelében halad el (vagyis $2 + 3d$ -nél kisebb távolságban, ahol d a detektor valamilyen jellemző mérete), vagy a záportengely éppenséggel valamelyik detektorfelületen halad át. $S_i f_i$ és a pontos $\iint_{(S_i)} f dx_i dy_i$ értékek ilyenkor óriási eltéréseket mutathatnak, pl. lehet, hogy $S_i f_i = \infty$

(ugyanis $f(0) = \infty$), míg $\iint_{(S_i)} f dx_i dy_i$ feltétlenül véges. És mégis, ha pusztán a

$\langle C(m; k, n) \rangle$ gyakoriságról van szó, az $\iint_{(S_i)} f dx_i dy_i = S_i f_i$ helyettesítés még ebben

az esetben is megengedhető, mert $N \iint_{(S_i)} f dx_i dy_i$ ilyen esetekben vagy nagyon nagy érték ($\gtrsim 100$) s ebben az esetben $\langle C(m; k, n) \rangle$ szempontjából teljesen mindegy, hogy e^{-100} vagy 0 szerepel-e (19)-ben, vagy pedig S_i értéke nagyon kicsi (pl. néhány cm^2), s ebben az esetben nagyon kicsi az a tartomány, amely hibás értékekkel járul hozzá a (19) integrál értékéhez. Vannak azonban olyan esetek (pl. $\langle N \rangle$ meghatározása), amikor az $\iint_{(S_i)} f dx_i dy_i = S_i f_i$ közepelés az észlelőfelületek környezetében nem engedhető meg.

a) A 2. A. a) esetben (koincidencia rendszám-változtatás) $n = k$, ill. $n = k + 1$, s így

$$\langle C_k \rangle = \iiint_{0 \ 0 \ 0}^{\infty \ \infty \ \infty} G_0 N^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^k (1 - e^{-S_i N f_i}) dN dx_0 dy_0, \quad (20)$$

ill.

$$\langle C_{k+1} \rangle = \iiint_{0 \ 0 \ 0}^{\infty \ \infty \ \infty} G_0 N^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^{k+1} (1 - e^{-S_i N f_i}) dN dx_0 dy_0.$$

A N szerinti integrálás a Jánossy—Broadbent eljárással [84], [85] elvégezhető. A $k=3$, $S_1=S_2=S_3=S_4=S$ esetben például (nem egész számú γ esetén)

$$\frac{\langle C_3 \rangle}{\langle C_4 \rangle} = \frac{\int_0^\infty \int_0^\infty w(f_1, f_2, f_3; \gamma) dx_0 dy_0}{\int_0^\infty \int_0^\infty w(f_1, f_2, f_3, f_4; \gamma) dx_0 dy_0}, \quad (21)$$

ahol

$$w(f_1, f_2, f_3; \gamma) = -(f_1^\gamma + f_2^\gamma + f_3^\gamma) + \\ + (f_1 + f_2)^\gamma + (f_1 + f_3)^\gamma + (f_2 + f_3)^\gamma - (f_1 + f_2 + f_3)^\gamma,$$

ill.

$$w(f_1, f_2, f_3, f_4; \gamma) = -(f_1^\gamma + f_2^\gamma + f_3^\gamma + f_4^\gamma) + \\ + (f_1 + f_2)^\gamma + (f_1 + f_3)^\gamma + (f_1 + f_4)^\gamma + (f_2 + f_3)^\gamma + (f_2 + f_4)^\gamma + (f_3 + f_4)^\gamma - \\ - \{(f_1 + f_2 + f_3)^\gamma + (f_1 + f_2 + f_4)^\gamma + (f_1 + f_3 + f_4)^\gamma + (f_2 + f_3 + f_4)^\gamma\} + \\ + (f_1 + f_2 + f_3 + f_4)^\gamma.$$

Egész számú γ esetében (21)-ben w helyett $\frac{dw}{d\gamma}$ írandó. (21) jobboldala lényegesen más mint (9)-é, csak akkor egyezik meg vele, ha $f(r)$ téglalap-alakú (l. (4)). A (21)-ben szereplő integrálok numerikus úton kiszámíthatók, ha az $f(r)$ oldalszerkezet is ismeretes. Ezt az utat azonban nem érdemes követni, mert a 2.A.b) eljárás (a felület-változtatás módszere) egyszerűbben célhoz vezet.

b) A 2.A.b) esetben is $n=k$, tehát $\langle C_k \rangle$ alakja a (20) alatti. Szorítkozunk arra az esetre, amikor valamennyi észlelőfelület nagyságát ugyanabban az arányban változtatjuk, tehát

$$S_i = \alpha s_i \quad (i = 1, 2, \dots, k).$$

A (20) egyenletben az N szerinti integrálást a Jánossy—Broadbent módszerrel elvégezve

$$\langle C_k(\alpha) \rangle = A \alpha^\gamma, \quad (22)$$

ahol

$$A = (-\gamma - 1)! G_0 \int_0^\infty \int_0^\infty \left[- \sum_{i=1}^k (s_i f_i)^\gamma + \sum_{i_1, i_2} (s_{i_1} f_{i_1} + s_{i_2} f_{i_2})^\gamma - \right. \\ \left. - \dots + (-1)^k (s_1 f_1 + s_2 f_2 + \dots + s_k f_k)^\gamma \right] dx_0 dy_0,$$

ill.

$$A = (-1)^{\gamma+1} G_0 \frac{1}{\gamma!} \frac{d}{d\gamma} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[- \sum_{i=1}^k (s_i f_i)^\gamma + \sum_{i_1, i_2} (s_{i_1} f_{i_1} + s_{i_2} f_{i_2})^\gamma - \right. \\ \left. - \dots + (-1)^k (s_1 f_1 + s_2 f_2 + \dots + s_k f_k)^\gamma \right] dx_0 dy_0$$

aszerint, hogy γ nem egész szám, vagy egész szám-e. (Az összegezések az 1, 2, ..., k elemek megfelelő rendű kombinációira terjesztendők ki.)

Az A mennyiség a mérés folyamán állandó, nem függ α -tól. Ezért akár a (10) akár a (22) alapján számítjuk a kitevő értékét, ugyanarra az eredményre jutunk:

$$\gamma = \gamma^*.$$

Ez a pontos magyarázata annak a ténynek, hogy a felületváltoztatásos módszerrel meghatározott γ érték nem érzékeny a berendezés adataira.

A levezetésben kihasználtuk azt, hogy valamennyi észlelőfelület nagyságát ugyanabban az arányban változtattuk. Ha ez a feltétel nem teljesül, akkor a mérés során változtatott mennyiség nem vihető ki az x_0, y_0 szerinti integrálás jele elé úgy, ahogyan az a (22) egyenletben megtörtént, tehát ebben az esetben γ^* becslült értéke és γ becslült értéke nem lesz pontosan azonos.

c) Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy a hodoszkópos módszernél (1. 2. A. c) pont) ismét nem választható szét külön tényezőbe egyfelől a γ becslés alapjául szolgáló n mennyiség (a megszólaló hodoszkóp-detektorok száma) másfelől a készüléket jellemző adatok ($S_v, x_v, y_v (v=1, 2, \dots, k)$; $S'_v, x'_v, y'_v (v=1, 2, \dots, m)$). Ugyanis (19) szerint ekkor nem egész számú γ mellett

$$\langle C(m; k, n) \rangle = G_0(-\gamma-1)! \int_0^\infty \int_0^\infty w dx_0 dy_0, \quad (23)$$

egész számú γ esetén pedig

$$\langle C(m; k, n) \rangle = (-1)^{\gamma+1} G_0 \frac{1}{\gamma!} \frac{d}{d\gamma} \int_0^\infty \int_0^\infty w dx_0 dy_0, \quad (23a)$$

ahol

$$w = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \sum_{\mu=1}^m \sum_{v=1}^n (-1)^{\mu+v} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_\mu} \sum_{l_1, l_2, \dots, l_v} ([S_{i_1} f_{j_1}]_1^\mu + [S_{j_1} f_{i_1}]_1^\mu + [S_{j_1} f_{j_1}]_1^\nu)^\gamma \quad (24)$$

A szögletes zárójelek itt összegezést jelentenek:

$$\begin{aligned} [S'_i f'_i]_1^\mu &= S'_{i_1} f'_{i_1} + S'_{i_2} f'_{i_2} + \dots + S'_{i_\mu} f'_{i_\mu}, \\ [S_j f_j]_{n+1}^k &= S_{j_{n+1}} f_{j_{n+1}} + S_{j_{n+2}} f_{j_{n+2}} + \dots + S_{j_k} f_{j_k}, \\ [S_{j_1} f_{j_1}]_1^\nu &= S_{j_{1_1}} f_{j_{1_1}} + S_{j_{1_2}} f_{j_{1_2}} + \dots + S_{j_{1_\nu}} f_{j_{1_\nu}}. \end{aligned}$$

A többszörös összeg-indexek jelentése: j_1, j_2, \dots, j_n jelenti az 1, 2, ..., k elemek egy tetszés szerinti n -ed osztályú kombinációját; i_1, i_2, \dots, i_μ jelenti az 1, 2, ..., m elemek egy tetszés szerinti μ -ed osztályú, l_1, l_2, \dots, l_v az 1, 2, ..., n elemek egy tetszés szerinti v -ed osztályú kombinációját. Az Σ jellel jelölt összegezések az összes lehetséges kombinációkra terjesztendők ki (kivéve a μ -re és a v -re vonatkozó összegezést).

Bár a gyakorlatban előforduló esetekben $\langle C(m; k, n) \rangle$ kifejezése egyszerűbb alakú (24)-nél, mert hodoszkóp-detektorok többnyire egymáshoz közel (egy — vagy

kevés számú — csoportban) helyezkednek el, mégis n általában nem emelhető ki az integrál jel elé. Például $S'_1 = S'_2 = \dots = S'_m = S_1 = S_2 = \dots = S_k (= S)$ és $f_1 = f_2 = \dots = f_k (= f_0)$ esetén

$$w = S^\gamma \sum_{\mu=1}^m \sum_{v=1}^m \sum_{i_1, i_2, \dots, i_\mu} (-1)^{\mu+v} \binom{n}{v} ([f_i]_1^\mu + (k-n+v)f_0)^\gamma,$$

ahonnan az n nem emelhető ki. (L. azonban a c) pont végén tett megjegyzést).

A kioldó számlálós módszerek közül a hodoszkópos módszer adja a leggyorsabban a legtöbb információt a sűrűség spektrumról, ill. a számspektrumról; ennek az információ mennyiségnek a teljes kiaknázása azonban rendkívül bonyolult numerikus számolásokat igényel. A sűrűség spektrum esetére az eljárás kidolgozása már megtörtént [90], a számspektrum esetére még nem.

B) Sűrűségbecslő módszerek

A II.2.B. pontban definiált $C(n_1, n_2, \dots, n_k)$ intenzitás várható értéke (18) segítségével a következőképpen írható:

$$\langle C(n_1, n_2, \dots, n_k) \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty G_0 N^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^k \frac{(S_i N f_i)^{n_i}}{n_i!} e^{-S_i N f_i} dN dx_0 dy_0,$$

ami az N szerinti integrálás végrehajtása után a következő alakba megy át:

$$(25) \quad \langle C(n_1, n_2, \dots, n_k) \rangle = G_0 \frac{(n_1 + n_2 + \dots + n_k - \gamma - 1)!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{(S_1 f_1)^{n_1} (S_2 f_2)^{n_2} \dots (S_k f_k)^{n_k}}{(S_1 f_1 + \dots + S_k f_k)^{n_1 + \dots + n_k - \gamma}} dx_0 dy_0$$

Az n_1, n_2, \dots, n_k részecskeszámok nem emelhetők ki az integrál-jel elé, tehát a (25) alapján meghatározott γ érték nem azonos a (17) alapján meghatározott γ^* értékkel.

C) Kioldó számlálók és sűrűségbecslő számlálók kombinációi

Ezek a berendezések elvileg nagyon hasonlóan a hodoszkóphoz. A kioldó számlálók játsszák rendszerint a vezérlőfelületek szerepét, míg a sűrűségbecslő számlálók tökéletesített hodoszkópoknak felelnek meg. Annnyiban tökéletesebb a működésük a kioldó számlálók felépített hodoszkóp-rendszereknél, amennyiben nagy pontossággal jelzik a rajtuk áthaladó ionizáló részecskék számát; a hodoszkóp-rendszerek megszólalt és meg nem szólalt csöveinek számából erre csak nagyon tág határok között lehetne következtetni.

A sokféle lehetséges kombináció általában mind megegyezik abban, hogy érzékeny az észlelőberendezés adataira: γ^* és γ nem egyezik meg. Azonban ha csak egyetlen sűrűségdetektort használunk és olyan nagy sűrűségeket válogatunk ki vele, amelyek a kioldó számlálót „telítésbe viszik” (ezen azt értjük, hogy gyakorlatilag 1 legyen a valószínűsége annak, hogy a kioldó számlálók megszólalnak, mikor a sűrűségdetektor a szóban forgó nagy sűrűségeket méri), akkor a mért γ^* független a berendezés adataitól és $\gamma^* \cong \gamma$.

Vizsgáljuk részletesebben ezt a speciális kombinációt. S_1, S_2, \dots, S_k jelentse a kioldó detektorok felület nagyságát, W a sűrűségdetektorét. Azoknak a KLZ-oknak az időegységenkénti száma, amelyek a kioldó detektorokat megszólaltatták és a sűrűségdetektoron pontosan n részecskét küldenek át, várható értékben:

$$\langle C(n) \rangle = \iiint_{0,0,0}^{\infty,\infty,\infty} G_0 N^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^k (1 - e^{-S_i N f_i}) \frac{(W N f_w)^n}{n!} e^{-W N f_w} dN dx_0 dy_0 \quad (26)$$

ahol

$$f_i = f(\sqrt{(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2}) \quad (i = 1, 2, \dots, k)$$

$$f_w = f(\sqrt{(x_w - x_0)^2 + (y_w - y_0)^2})$$

és x_i, y_i a kioldó detektorok középpontjainak, x_w, y_w a sűrűségfelület középpontjának és x_0, y_0 a záportengely dőfspontjának koordinátái az észlelés síkjában.

(26) konvergenciájának szükséges feltétele, hogy $\gamma < n + k$ legyen. Ebben az esetben az N szerinti integrálás elvégezhető. Az eredmény a következő:

Ha $(n - \gamma)(n + 1 - \gamma) \dots (n + k - \gamma) \neq 0$, akkor

$$\langle C(n) \rangle = G_0 \frac{(n - \gamma - 1)!}{n!} \int_0^\infty \int_0^\infty (W f_w)^\gamma g(\alpha_1, \dots, \alpha_k; \gamma - n) dx_0 dy_0, \quad (27)$$

míg $(n - \gamma)(n + 1 - \gamma) \dots (n + k - \gamma) = 0$ esetén

$$\langle C(n) \rangle = (-1)^{\gamma+1} G_0 \frac{1}{\gamma!} \frac{1}{n!} \frac{d}{d\gamma} \int_0^\infty \int_0^\infty (W f_w)^\gamma g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k; \gamma - n) dx_0 dy_0, \quad (27a)$$

ahol

$$\alpha_i = \frac{S_i f_i}{W f_w} \quad (i = 1, 2, \dots, k)$$

és

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k; \gamma - n) = 1 - \sum_{i=1}^n (1 + \alpha_i)^{\gamma-n} + \sum_{i_1, i_2} (1 + \alpha_{i_1} + \alpha_{i_2})^{\gamma-n} - \sum_{i_1, i_2, i_3} (1 + \alpha_{i_1} + \alpha_{i_2} + \alpha_{i_3})^{\gamma-n} + \dots + (-1)^k (1 + \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_k)^{\gamma-n}.$$

Az összegeзések az $1, 2, \dots, k$ elemek valamennyi (megfelelő rendű) kombinációira terjesztendők ki. (27)-ből rátekintéssel látszik, hogy ha n elég nagy, akkor tetszés szerinti kicsiny *relatív* hibával

$$\langle C(n) \rangle \approx G_0 \frac{(n - \gamma - 1)!}{n!} \int_0^\infty \int_0^\infty (W f_w)^\gamma dx_0 dy_0. \quad (28)$$

A jobboldalon álló kettős integrál nem tartalmazza n -et, tehát beolvasztható a G_0 állandóba; γ meghatározásában az észlelőberendezés adatai nem játszanak szerepet. Adott n mellett az elkövetett hiba nagy mértékben függ az $\frac{S_i}{W}$ hányadosoktól:

minél kisebb a sűrűségdetektor felülete a kioldó detektorok felületéhez képest, annál kisebb lesz az elkövetett hiba.

Érdemes megemlíteni, hogy a kioldó számlálókából felépített hodoszkópok (II.2.A.c) módszer) alkalmazása esetén is elérhető, hogy $\gamma^* \cong \gamma$ tetszés szerinti közelítésben fennálljon. A fenti feltételek analógiájára, ehhez az szükséges, hogy a hodoszkóp-rendszer csövei nagyon közel legyenek egymáshoz (a KLZ sűrűség-változása a hodoszkóp-felületen belül elhanyagolható legyen) és csak olyan esetekre szorítkozzunk, amelyekben elég sok hodoszkóp-cső szólalt meg (a vezérlő felületek telítésbe kerüljenek: ez nyilván annál könnyebben érhető el, minél kisebb egy hodoszkóp-cső felülete a vezérlőcsövek felületéhez képest).

4. A mérési tartomány becslése

Akár a számspektrum kitevőjét (γ), akár a sűrűségpektrum kitevőjét (γ^*) határozzuk is meg, az eredmény a záporok egy bizonyos (részecseszámból álló vagy sűrűségű) csoportjára érvényes csak. Meg kell határozni azt a részecseszám-ill. sűrűségtartományt, amely magába foglalja a mérés tárgyát képező záporokat.

A számspektrum közvetlen mérés (II.1. módszer) esetén ez a tartomány a mérés természetéből következőleg azonnal kiadódik, mert minden egyes zápor részecseszámát amúgyis meg kell határozni. A többi módszerek alkalmazása esetén azonban a mérési tartomány becslése külön feladatot jelent.

Az irodalomban általában nem fordítanak kellő figyelmet erre a kérdésre. Kioldó számlálók alkalmazása esetén többnyire az $1/S_{\max} < \Delta < 1/S_{\min}$ tartományt, sűrűségbecslő számlálók alkalmazása esetén pedig az $n_{\min}/S_{\max} < \Delta < n_{\max}/S_{\min}$ tartományt szokták feltüntetni mérési tartományként. (S_{\min} ill. S_{\max} az alkalmazott legkisebb, ill. legnagyobb számlálócsőfelület; n_{\min} az S_{\max} felületű sűrűségbecslő számlálóval észlelt legkisebb részecseszám, n_{\max} pedig az S_{\min} felületű sűrűségbecslő számlálóval észlelt legnagyobb részecseszám.) Ez a becslés igen durva: egy teljes nagyságrenddel is eltérhet a szigorú elveken alapuló becsléstől.

A sűrűségtartomány becslése sokkal pontosabban történhet, mint a részecseszám-tartományé, ezért az utóbbit általában vissza szokták vezetni az előbbire.

A) Sűrűségpektrum mérési tartományának becslése

A sűrűségpektrum mérése úgy történik, hogy a berendezés valamilyen paraméterének (vagy paramétereinek) függvényében mérjük az észlelt KLZ-ok intenzitását s az észlelt intenzitásokat összehasonlítjuk a sűrűségpektrum alapján kiszámított várható értékkel. Ezek a várható értékek

$$\langle C(\bar{n}) \rangle = \int_0^{\infty} P(\Delta; \bar{n}) d\Delta$$

alakúak, ahol \bar{n} az n_1, n_2, \dots, n_p változó paramétersereg helyett áll.

Például egyetlen sűrűségmérő és négy kioldó számláló alkalmazása esetén egyetlen változó paraméterünk van, s ez n , a sűrűségmérő felületre eső részecskék száma, s így

$$P(\Delta, n) = H_0 \Delta^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^4 (1 - e^{-S_i \Delta}) \frac{(W\Delta)^n}{n!} e^{-W\Delta} \quad (30)$$

A mérés időtartama (T) alatt észlelt összes záporok számának várható értéke (feltéve, hogy a mérés minden egyes paraméterérték mellett ugyanannyi ideig tartott):

$$T \sum_n \langle C(\bar{n}) \rangle = T \int_0^\infty \sum_{\bar{n}} P(\Delta; \bar{n}) d\Delta,$$

ahol az összegezés az \bar{n} változó paramétersereg összes értékeire kiterjesztendő. Tehát a

$$p(\Delta) = \frac{1}{\sum_{\bar{n}} \langle C(\bar{n}) \rangle} \int_{\bar{n}} \sum_{\bar{n}} P(\Delta'; \bar{n}) d\Delta' \quad (\leq 1) \quad (31)$$

kifejezés megadja az észlelt záporok azon hányadának a várható értékét, amelyek a $(0, \Delta)$ sűrűségtartományba esnek. Vegyük a $p(\Delta)$ függvény inverzét, vagyis adott p számhoz (amely ≤ 1) definiáljuk a $\Delta(p)$ számot a

$$p = \frac{1}{\sum_{\bar{n}} \langle C(\bar{n}) \rangle} \int_0^{\Delta(p)} \sum_{\bar{n}} P(\Delta'; \bar{n}) d\Delta' \quad (31a)$$

egyenlettel: $(0, \Delta(p))$ tartomány — ha elég sokáig mérünk — az összes észlelt záporok számának 100 $p\%$ -át fogja tartalmazni. Ebben az értelemben, bár nem egészen helyesen, úgyis fogalmazhatjuk ezt a kijelentést, hogy a $(0, \Delta(p))$ tartomány „100 $p\%$ valószínűséggel tartalmazza” az észlelt KLZ-okat.

Természetesen minden $(\Delta(p_1), \Delta(p_2))$ tartomány is 100 $p\%$ valószínűséggel tartalmazza az észlelt KLZ-okat, hacsak $p_2 - p_1 = p$. A mérési tartomány kijelölése tehát mindenképpen bizonyos mértékben önkényesen történhet csak. A leghelyesebb grafikus megadni a $p(\Delta)$ függvényt: ebből a grafikonból azután kiválasztható az a tartomány, amely az adott körülmények között a legjobban jellemzi a mérést.

A $p(\Delta)$ függvény kvantilisai jellemzőek a kiválasztott záporcsoportra. Bizonyos esetekben a legvalószínűbb sűrűség (az a Δ_{\max} érték, amelyre a $\sum_{\bar{n}} P(\Delta, \bar{n})$ függvény értéke a legnagyobb) bírhat jelentőséggel, vagy a sűrűségnek a kiválasztott záporcsoportra vonatkozó várható értéke, amit a

$$\langle \Delta \rangle = \frac{1}{\sum_{\bar{n}} \langle C(\bar{n}) \rangle} \int_0^\infty \sum_{\bar{n}} \Delta P(\Delta, \bar{n}) d\Delta$$

kifejezés definiál.

B) A számspektrum mérési tartományának becslése

Ez elvileg az előzőekben leírtakhoz teljesen hasonlóan történhetné, vagyis a

$$p(N) = \frac{1}{\sum_{\bar{n}} \langle C(\bar{n}) \rangle} \iiint_0^\infty \sum_{\bar{n}} P(N', x_0, y_0; \bar{n}) dN' dx_0 dy_0 \quad (32)$$

integrál kiszámítása útján. (Például egyetlen sűrűségmérő és négy kioldó számláló alkalmazása esetén

$$P(N, x_0, y_0; \bar{n}) = G_0 N^{-\gamma-1} \prod_{i=1}^4 (1 - e^{-S_i N f_i}) \frac{(W N f_w)^n}{n!} e^{-W N f_w}.$$

A (32) típusú integrálok azonban nagyon érzékenyek az $f(r)$ oldalszerkezet-függvény alakjára. Az $f(r)$ -ben szereplő paraméterek értékében 20–30%-os hiba elegendő ahhoz, hogy a (32) kifejezés divergenssé váljék. Az $f(r)$ függvényt tehát — különösen a záportengely közvetlen közelében — jóval pontosabban kellene ismernünk ahhoz, hogy a részecskeszám-tartományokat (32) alapján számíthassuk.

Nagyságrendileg helyes becslést kaphatunk a részecskeszám-tartományokra a sűrűségtartományok alapján, ha feltételezzük, hogy a záporok sűrűsége a $0 \leq r \leq r_0$ helyeken Δ_{atl} , s azon túl zérus; r_0 az elektronok átlagos oldalszóródása, ami $z \text{ gcm}^{-2}$ atmoszferikus mélységben körülbelül $56\,000/z$ méter [56]. Ezek szerint a Δ átlag-sűrűségű zápor összrészecskeszáma

$$N \cong r_0^2 \pi \Delta \cong (1000/z)^2 \cdot 10^4 \Delta. \quad (32a)$$

5. Összefoglalás

Az elmondottakból megállapítható, hogy a KLZ-ok számspektrumát kimérhetjük az egyes záporok össz-részecskeszámának meghatározása nélkül (vagyis óriás-berendezések alkalmazása nélkül) is, a következő módszerek valamelyikével:

a) Felületváltoztatásos módszer (valamennyi felület nagysága ugyanabban az arányban változtatandó).

b) Egyetlen sűrűségdetektor segítségével, olyan sűrűségtartományban, amelyben a vezérlő felületek már „telítve” vannak.

c) Nem nagy területre ($\sim 10 \times 10 \text{ m}^2$) kiterjedő hodoszkóp segítségével, ugyancsak olyan sűrűségtartományban, amelyben a vezérlő felületek már telítve vannak.

Az a) módszer inkább a spektrum kis sűrűségű végének, a b) és c) módszer inkább a nagy sűrűségek felé eső végének kimérésére alkalmas, a sűrűségspektrum mérése szempontjából egyébként e módszerek egyenértékűek. A b) és a c) módszerek azonban a sűrűségspektrum (számspektrum) mérésén kívül a KLZ-ok egyéb tulajdonságainak egyidejűleg történő mérését is lehetővé teszik, különösen a b) módszer, ha sűrűségdetektorként részecskenyomdetektort (ködkamrát vagy szikrakamrát) alkalmazunk.

III. A kiterjedt légizáporok számspektrumának meghatározására végzett mérés ismertetése

1. A mérési módszer általános jellemzése

A Központi Fizikai Kutatóintézet Kozmikus Sugárzási Laboratóriumában még 1955-ben elkészült egy Geiger—Müller csöves vezérlésű, automatikus üzemi ködkamra. A ködkamra segítségével főként KLZ-okra vonatkozó sokoldalú kutatás folyt: a KLZ-okban haladó fotonok és elektronok számarányának mérése [76],

a KLZ-ok áthatolási effektusának mérésére [77], a KLZ-ok zenitszögeloszlása és ennek alapján a KLZ-ok abszorpciós úthosszáinak mérése [41], s végül a nagy részecske számú KLZ-ok számspektrumának mérése [21], [91].

E közben — az adott kutatási célnak megfelelően — több ízben is változtak a vezérlés feltételei, vagy a kamra fölötti abszorbens mennyisége. Volt azonban egy hosszú periódus, amikor a vezérlés feltételei változatlanok voltak és sem a kamra, sem a vezérlő GM-csővek felett nem volt abszorbens. 6509 felvétel készült ilyen körülmények között. Ez a mérési anyag lehetővé tette a nagy részecskeszámú KLZ-ok számspektrumának mérését.

A számspektrum ilyen módon történő meghatározása több szempontból is igen előnyös:

Mindenekelőtt azért, mert a mérések sűrűségmérő berendezéssel történtek, és pedig ködkamrával, amely a sűrűségmérő eszközök közül a legpontosabb részecskeszámlálást teszi lehetővé. Előnyösen történt a vezérlés megválasztása is: a vezérlő GM-csővek felülete egyenként körülbelül kétszerese volt a ködkamra érzékeny felületének, ami annyit jelent, hogy a számlálócsövek bizonyosan telítődtek (gyakorlatilag 1 volt a valószínűsége annak, hogy esett rájuk legalább egy ionizáló részecske), ha olyan záporokat válogattunk ki, amelyek mintegy $n=10$ ionizáló részecskét, vagy ennél többet küldtek át a ködkamrán. Ez vonta maga után azt, hogy az $n \geq 10$ feltétel mellett észlelt sűrűség spektrum gyakorlatilag azonos volt a számspektrummal, tehát a mérés a számspektrum kitevőjét szolgáltatatta, óriásberendezés építése nélkül is. (Részletesebben l. III.3.)

A kamra kicsi mérete (30 cm átmérőjű hengeres kamrát használtunk) nem jelentett hátrányt ennél a mérésnél, mert *adott sűrűségű (részecskeszámú) záporokból* nagyobb felületű kamrával sem lehetett volna *többet* észlelni ugyanannyi idő alatt. Nagyobb felületű kamra több részecskét észlelt volna az egyes záporokból, tehát pontosabb sűrűségmérést tett volna lehetővé. A végeredmény statisztikus hibája azonban elsősorban onnan származik, hogy kevés záport észleltünk (a nagy sűrűségű záporok igen ritkák) és nem onnan, hogy az egyes záporok sűrűségére csak pontatlan információink volt.

A ködkamra nem vett részt a záporok kiválasztásában: az észlelt záporok száma kizárólag a vezérlő GM-csővektől (relatív helyzetüktől, a felettük levő abszorbenstől) függött. Nagyobb felületű vezérlő csövekkel több záport lehetett volna ugyan észlelni, de a többlet mind kis sűrűségű záporoktól származott volna, tehát vizsgálatunkhoz értéktelen lett volna.

2. A mérőberendezés leírása

A berendezés Budapesten, a Központi Fizikai Kutatóintézetben, 410 m tengerszintfeletti magasságon épült faházban volt felállítva. Szükséges ugyanis, hogy minél kisebb mennyiségű és rendszámú anyag legyen a berendezés felett és körülötte: ellenkező esetben a záporok szerkezetében helyi jellegű erős változások állnának be. A faház tetejének vastagsága kb. 8 g cm^{-2} . A berendezés alaprajza a 6. ábrán látható. Két lényeges részből áll: a) a ködkamra, b) a vezérlő GM-csővek.

a) A ködkamra és a hozzátartozó elektronikus- és szervoberendezés

A ködkamra részletes leírása [92]-ben található, itt csak a legfontosabb részletekre szorítkozunk.

A kamra fala 5 mm vastag, 300 mm átmérőjű, 200 mm hosszúságú vízszintes tengelyű üveghenger, a fényképezőgép felőli oldalon egy 20 mm vastag planparallel üveglemez, a hátsó oldalon a dugattyú határolja (l. 7. ábra). Töltése argon, telített *n*-propilalkohol és vízgőz, 920 hgmm össznyomásig.

Az expanziót a dugattyú hirtelen hátraugrása létesítette. A dugattyú hirtelen elmozdulását a mögötte fenntartott nyomás (kb. 1,7 atm) hirtelen csökkentése (a külső légnyomásra) hozta létre. Az expanzióviszony értékét a lökethossz szabta meg, ez többnyire 16 mm volt, ami átlagosan 8% térfogati expanziónak felelt meg.

Az expanziót a vezérlő GM-csövek koincidencia-jele indítja meg oly módon, hogy a megfelelően átalakított jel egy elektromágnesen vezérelhető szelepet nyit. A koincidencia-jel egyúttal a) azonnal (tehát még az expanzió kezdetén) kikapcsolja a tisztító feszültséget (a kamrában, az állandóan keletkező ionok eltávolítására,

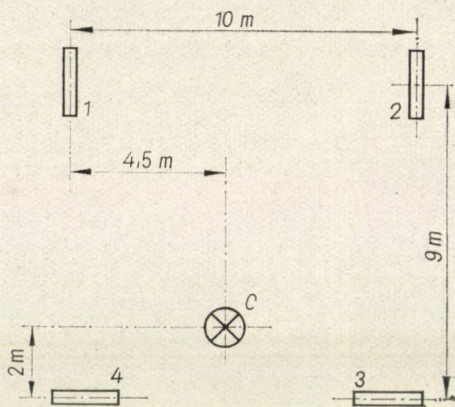
az expanziót és az azt követő néhány tizedmásodpercet kivéve állandóan mintegy 80 V/cm erősségű statikus villamos teret kell létesíteni) b) blokkoló egységet indít be: ez az egység (a feloldójel beérkezéséig) megakadályozza azt, hogy a kamra újabb vezérlőjel hatására működésbe jöjjön, c) mintegy 0,10 sec (a dugattyú elmozdulásához és a cseppek felnövekedéséhez szükséges idő) késleltetés után felvillantja a cseppek megvilágításához szükséges flash-csőveket, d) megindítja a szervomechanizmust.

A szervomechanizmus a következő funkciókat látja el: a) minden koincidencia-jellel vezérelt expanzió után négy lassú expanziót indít be, a kamrában keletkezett köd eltávolítása céljából, b) továbbítja a filmet a fényképezőgépben, c) előre meghatározott idő (3,5 perc) eltelte után feloldja a blokkoló-kört, s ezzel a berendezés újabb ciklus elvégzésére készen áll.

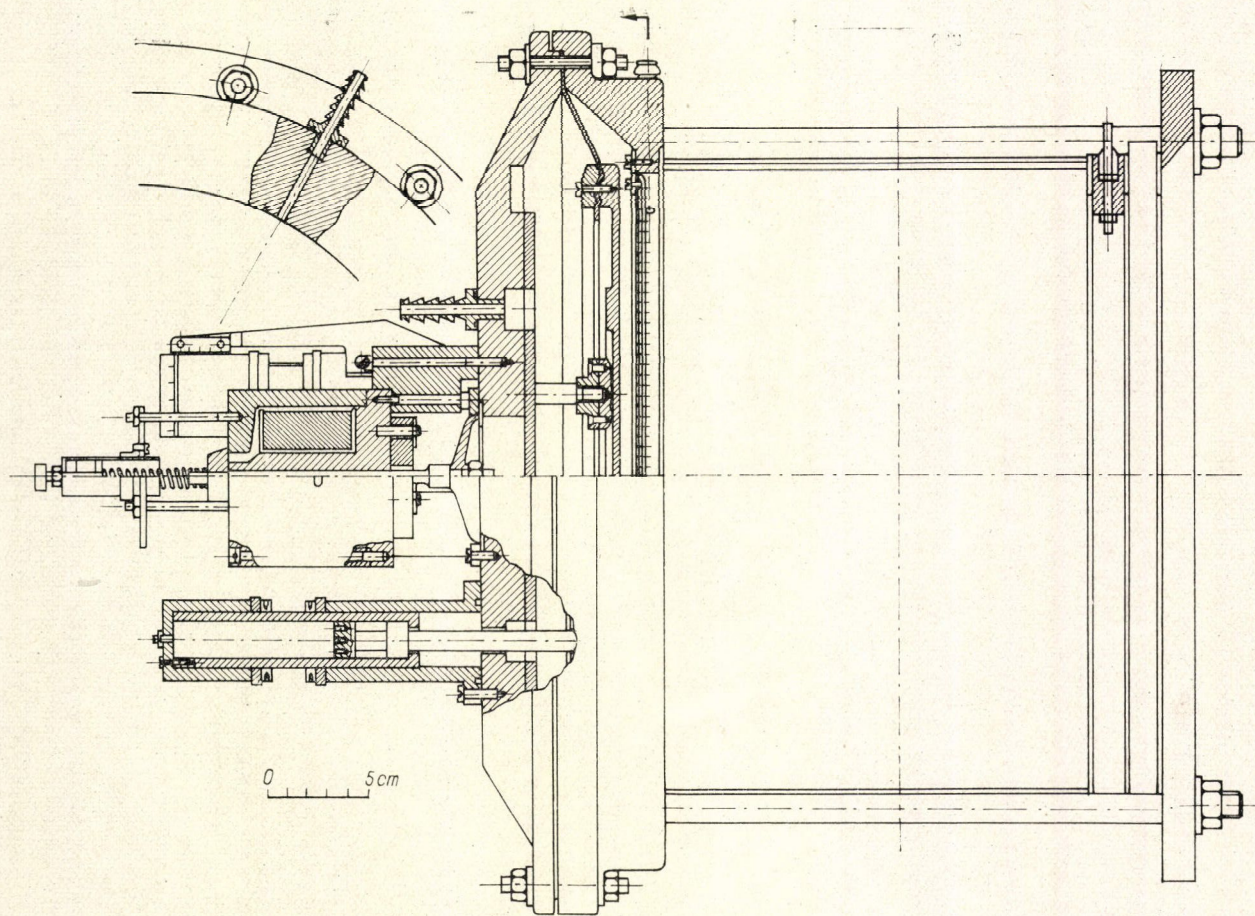
A fényképezés 114 mm bázistávolságon sztereoszkopikusan történt, 1:2,8 nyílású Zeiss Tessar objektívvel.

Különböző hőmérsékleteken különböző expanzióviszonyok mellett kapjuk a legkedvezőbb cseppképződési feltételeket. Minthogy konstans expanzióviszonnyal dolgoztunk, gondoskodni kellett arról, hogy a hőmérséklet a kamra belsejében huzamosabb idő alatt is körülbelül 1 °C-ra állandó maradjon. Ennek biztosítására a) a dugattyú mögötti tér túlnyomásának előállítására használt levegő hőmérsékletét stabilizálni kellett, b) a kamrát és a hozzá közvetlenül csatlakozó berendezéseket (fényképezőgép, megvilágító flash-csővek) $2 \times 2,4 \times 2 \text{ m}^3$ méretű fabódéba helyeztük, a fabódé belsejének hőmérsékletét vízhűtéssel, vagy meleg levegőnek a bódé falaiban történő áramoltatásával kb. $\pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra állandóan tartottuk. A fabódé falvastagsága kb. 2 gcm^{-2} , tehát a ködkamra felett (az épület tetőszerkezetével együtt) körülbelül 10 gcm^{-2} -nyi abszorbens volt.

A kamra belsejében hét, közel vízszintes helyzetű ólomlemez volt rögzítve: a felső három lemez egyenként 3 mm, az alsó négy lemez egyenként 6 mm vastag volt.



6. ábra. A berendezés alaprajza
1, 2, 3, 4 GM csövek, C ködkamra



7a ábra A ködkamra függőleges metszete

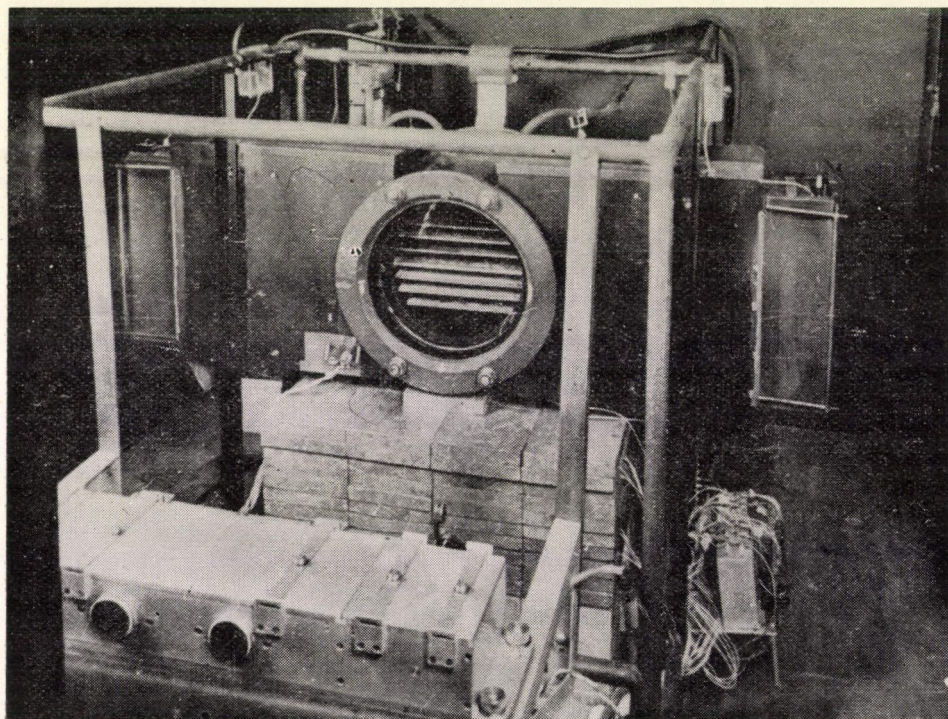
Ezek a lemezek ennél a vizsgálatnál nem játszottak szerepet, de nem is zavartak. A kamra érzékeny felületének a legfelső ólomlemez megvilágított részének expanzió előtti vízszintes metszetét kell tekinteni. Az ólomlemezeken jelenléte mindössze annyi hátrányt jelentett, hogy ezáltal a kamra érzékeny felülete mintegy 40%-kal kisebb lett, ugyanis a legfelső ólomlemez hasznos szélessége a kamra hasznos átmérőjének mintegy 60%-a.

A legfelső lemez megvilágított részének mélységét a következőképpen mértük:

A megvilágítás a fényképezés irányára merőlegesen, körülbelül 10–12 cm széles sávon történt (8. ábra). A sáv elülső (a fényképezőgép felé eső) széle az ólomlemez széle előtt helyezkedett el. Az elülső oldalon tehát az ólomlemez széle jelentette az érzékeny felület határát és nem a megvilágított térrész széle.

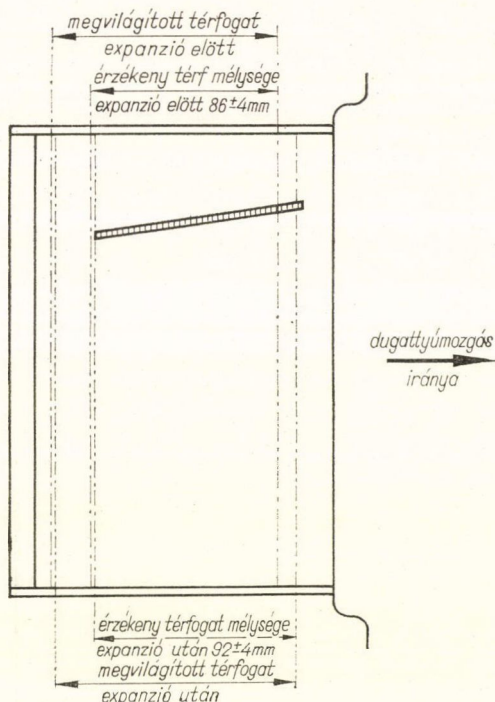
Voltak természetesen olyan nyomok is a fényképfelvételeken, amelyek az ólomlemezeken előtt haladtak el, ezek azonban akár egyetlen (nem sztereo-) fényképfelvételen is könnyen felismerhetők voltak és a nyomok megszámlálásánál nem vettük figyelembe őket.

A megvilágított térrész hátsó széle azonban még rajta volt az ólomlemezen, ezért az érzékeny felületet hátul a megvilágított térrész határa determinálta. A megvilágított térrész határának helyzetét úgy állapítottuk meg, hogy elég sok nyomot tartalmazó felvételeken kikerestünk olyan nyomokat, amelyek közel vízszintesen haladtak és hátrafelé kimentek a megvilágított térrészből, (vagy hátulról jöttek



7b ábra. A ködkamra fényképe

be oda) majd Zeiss sztereokomparátorral megmértük a nyomok eltűnési helyének parallaxisát, valamint a lemez első és hátsó élének parallaxisát. A lemez szélessége 12 cm; ebből és a mért parallaxisokból a megvilágított térrész hátsó élének helyzete meghatározható, távolsága az ólomlemez elülső szélétől



8. ábra A ködkamra megvilágított térfogatának és érzékeny térfogatának függőleges metszete

csövek, érzékeny hosszúságuk 842 mm, tehát érzékeny felületük 320 cm^2 . Töltésük 90 hgmm argon és 10 hgmm etilalkohol [93].

A GM-csövek feszültségimpulzusát kioltó-formálókör alakította át kb. $3 \mu\text{sec}$ hosszúságú nagymerekségű négyszög-jellé. A formálókör egyúttal kb. 250 volt nagyságú negatív jelet küldött a GM-cső szálára, ez megakadályozta az elektron-lavina kiterjedését a teljes anódszál-hosszúságon, ami részint a számlálócső élet-tartamát hosszabbítja, részint a téves impulzusok számának csökkentésében segít.

A jeleket egy közönséges Rossi-típusú koincidencia-körbe vezettük. A felbontóképességet ($3 \mu\text{sec}$) lényegileg a jelek hosszúsága szabta meg. A véletlen koincidenciák száma ilyen körülmények között teljesen elhanyagolható ($\approx 0,001/\text{év}$). A koincidencia-jeleket egyfelől egy végerősítővel működtetett elektro-mechanikus számláló számolta, másrészt továbbítottuk azokat a ködkamrához, ahol a már leírt munkaciklust indították meg. Az elektronikus kapcsolások részletes leírása [94]-ben található.

A koincidencia-jelek gyakorisága $2,76 \pm 0,04/\text{óra}$ volt.

$92 \pm 4 \text{ mm}$ -nek adódott. A legfelső lemez hasznos szélessége elöl $171 \pm 3 \text{ mm}$, hátul $189 \pm 3 \text{ mm}$, tehát a megvilágított trapéz hátsó élhosszúsága $185 \pm 2 \text{ mm}$, s így a megvilágított rész területe $164 \pm 7 \text{ cm}^2$.

A megvilágítás azonban az expansió után történik, s az expansió minden vízszintes felületet megnyújt, közelítőleg a térfogati expansióviszony arányában. Ez utóbbi átlag 8% volt, tehát a kamra érzékeny felülete $W = 151 \pm 7 \text{ cm}^2$.

A ködkamra érzékeny felületének nagysága tehát csak meglehetősen nagy ($\pm 5\%$) hibával ismeretes. Ez nem az alkalmazott mérési módszerek következménye, hanem túlnyomórészt onnan származik, hogy maga az érzékeny felület geometriailag nem definiálható jól. Megvizsgáltuk a hiba hatását mérésünk végeredményeire (I. III. 5.): a nagy sűrűségek (nagy részecskeszámok) tartományában ez a hatás elhanyagolhatóan bizonyult.

b) A vezérlő GM-csövek

A GM-csövek 40 mm külső átmérőjű, 1 mm falvastagságú vörösréz-

3. A fényképfelvételek kiértékelése. A ködkamra felbontóképessége

A fényképfelvételek kiértékelése egy erre a célra átalakított 6,3-szoros nagyítású Zeiss SM XVI sztereomikroszkópon történt (az átalakított készülék leírását l. [95]). Néhány tipikus felvételt a 9a—d ábrákon mutatunk be.

A kiértékelés abból állt, hogy meg kellett állapítani, hány ionizáló nyom volt látható a kamra legfelső ólomlemeze felett. A leszámolás a két sztereofelvétel térbeli vizsgálata útján történt: ílymódon el lehetett kerülni olyan nyomok megszámlálását, amelyek az ólomlemezhez közeli pontban kiléptek a megvilágított térrészből és könnyebben lehetett észrevenni az ólomlemez előtt áthaladó nyomokat is.

A nagy sűrűségű (tíz, vagy ennél több nyomot tartalmazó) felvételeken nehéz a sztereomikroszkópon át megszámlálni a nyomokat, ezért ezeket a felvételeket kivettítettük és a nyomokat a sztereo-pár mindkét felvételén megszámláltuk. A megszámlálást többször megismételtük és végeredménynek az egész számra kikerekített középértéket tekintettük. A nyomok számának megállapítása, e megismételt mérések tanúsága szerint, a több mint tíz nyomot tartalmazó fényképfelvételeken mintegy 10%-os szórást mutat, kivéve a legsűrűbb felvételt ($n \approx 200$), ahol a nyomok számának meghatározási bizonytalansága becslésünk szerint mintegy 20%. Megvizsgáltuk e hibák hatását \bar{y} mért értékére (III. 4.), s az elhanyagolhatónak bizonyult \bar{y} statisztikus hibája mellett.

A számlálás alkalmával minden nyomot figyelembe vettünk, tekintet nélkül az irányára vagy energiájára. Ez alól egy kivétel volt csupán: a radioaktív eredetű nyomok. Ezek könnyen felismerhetők voltak a következő tulajdonságaik alapján:

Rövid hatótávolságú nyomok ezek, s ha elektronok, akkor ezen felül még rendkívül erősen szóródnak is: nyomuk össze-vissza görbült; ha pedig α -részek, akkor rendkívül erősen ionizálnak, tehát nagyon tömött nyomot hagynak. Ezenkívül ezek a nyomok az esetek legtöbbszörében elmosódottak, mert a radioaktív bomlás legtöbbször még a vizsgált zápor beérkezése előtt történt és az ion-oszlop diffúziója miatt kiszélesedett vagy a tisztító-tér következtében nem egyszer ketté is vált.

A radioaktív eredetű részek tehát a felvételek átnézése során könnyen felismerhetők és kihagyhatók voltak. Előfordulhatott ellenben, hogy egy vagy több olyan kozmikus sugárzási rész futott át a ködkamrán egy KLZ-al nagyjából egyidőben, amely nem volt semmi összefüggésben a záporral. Ezeket a nyomokat nem lehet megkülönböztetni a KLZ részek nyomaitól, tehát — amennyiben számottevően gyakoriak — számukat korrekcióba kell venni.

Gyakoriságuk megállapítása céljából a ködkamra időbeli felbontóképességét kell kiszámítani.

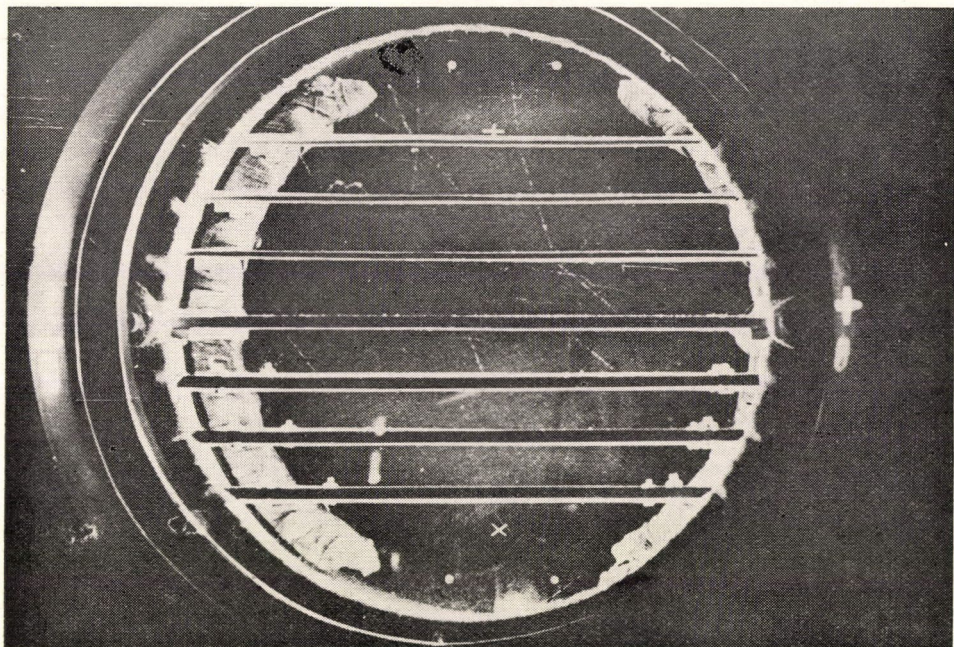
Ismeretes, hogy egy ionoszlop diffúzió következtében bekövetkező tágulása (mielőtt lecsapódás történt volna az ionokra) a következő összefüggéssel írható le [96]:

$$r = 0,86 \sqrt{t} \text{ cm},$$

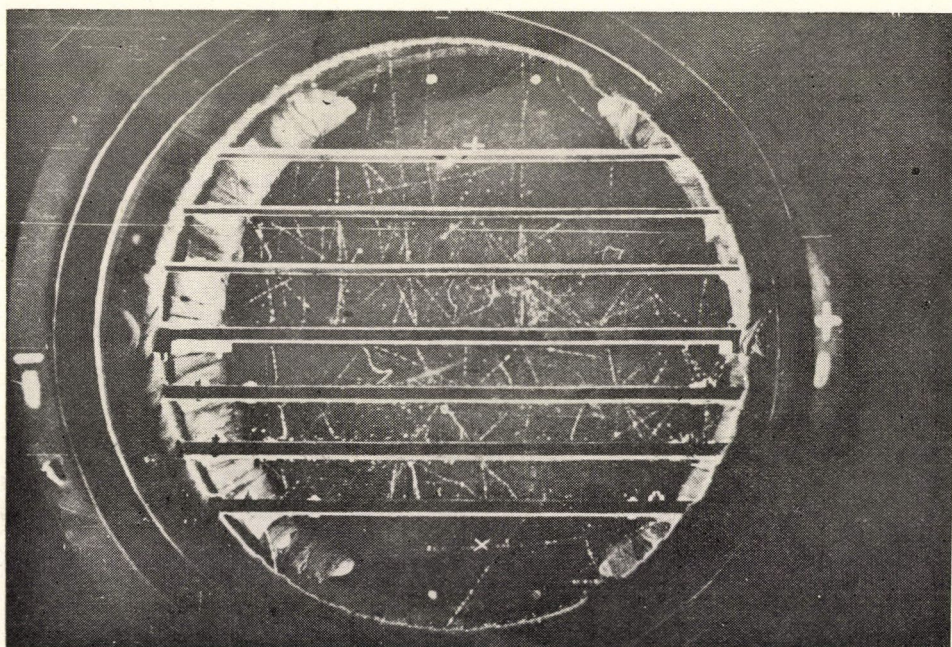
ahol r annak a hengernek a sugara a t [sec] időpontban, amely az ionok 90%-át magába zárja. Ha a tisztító tér még nincs lekapcsolva, akkor a pozitív és negatív ionok szétválása is az ionoszlop látszólagos megvastagodását (esetleg szétválását) idézi elő. Az ionmozgékonyág esetünkben kb. $1,5(\text{cm sec}^{-1})/(\text{Vcm}^{-1})$ a tisztító tér kb. 80 Vcm^{-1} , tehát az ionoszlop vastagodása (szétválása) az

$$r = 120t$$

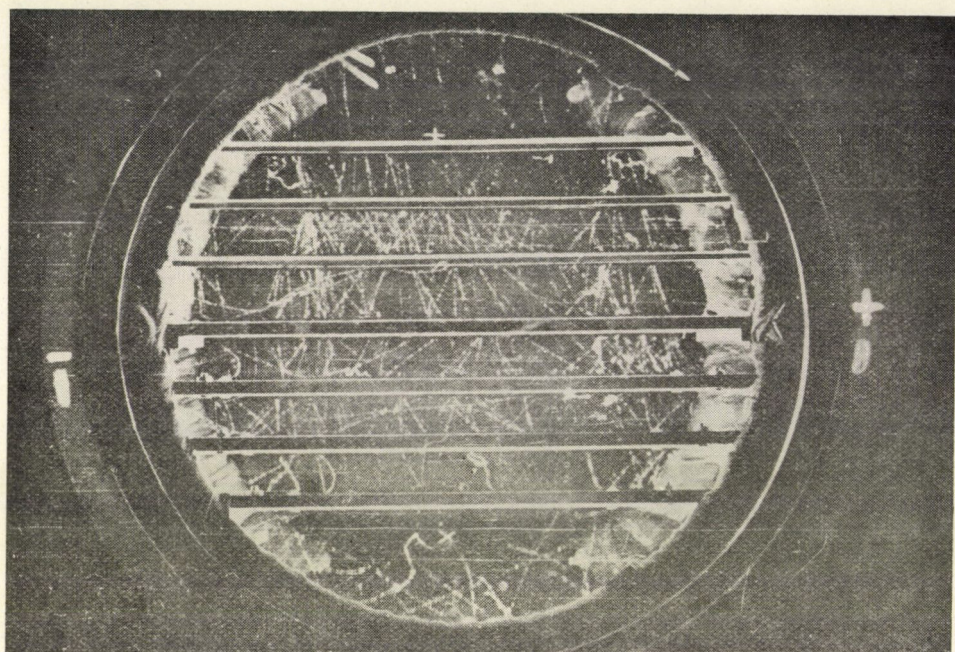
törvény szerint történik.



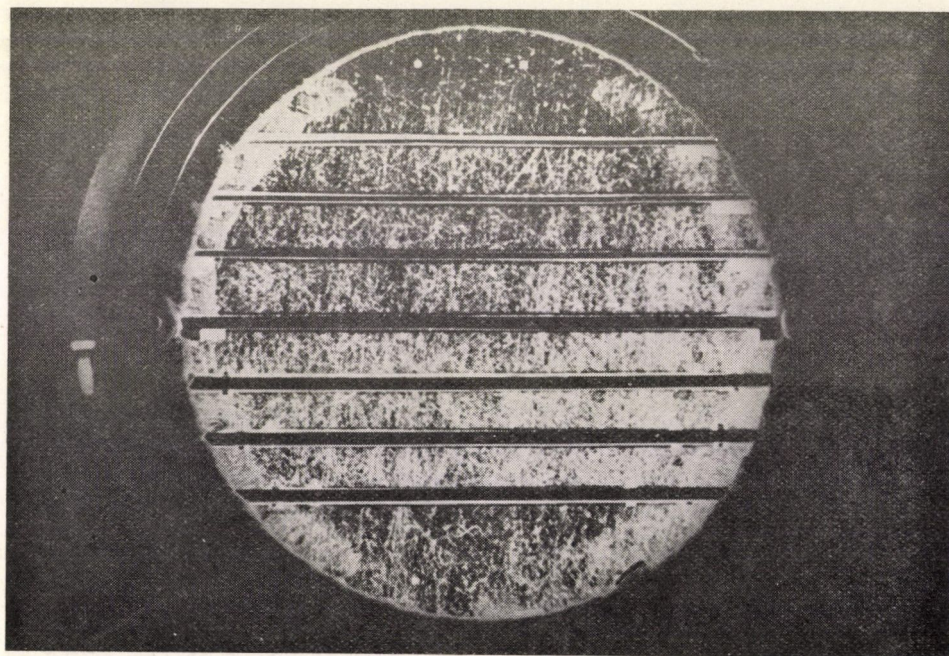
9a ábra



9b ábra



9c ábra



9d ábra

A KLZ beérkezése, a tisztító tér lekapcsolása és az expanzió megindulása gyakorlatilag egyidőben történik. Jelöljük t_0 -val azt az időt, ami a KLZ beérkezése és a lecsapódás megindulása (a szükséges túltelítés elérése) között eltelik. Ez az időtartam tehát gyakorlatilag a dugattyú repülési idejével egyezik meg, ami a mérések tanúsága szerint kb. 8 ± 1 millisec volt. A KLZ nyomok vastagsága tehát

$$r_0 = 0,76\sqrt{t_0} \approx 0,077 \text{ cm}, \quad (33)$$

ami körülbelül egyezik azzal a nyomszélességgel, amit a fényképfelvételekről meg lehetett állapítani.

Ha egy részecske a KLZ beérkezése előtt t_1 sec-al futott át a kamrán, akkor nyomának szélessége

$$r_1 = 120t_1 + 0,86\sqrt{t_0 + t_1},$$

ha pedig t_2 sec-al a KLZ beérkezése után haladt át a kamrán, nyomszélessége

$$r_2 = 0,86\sqrt{t_0 - t_2}.$$

A túl vastag ($r_1 \geq 2r_0$) és a túl vékony ($r_2 \leq 0,3r_0$) nyomokat a felvételek átvizsgálása során figyelmen kívül hagytuk, tehát csak azokat a nyomokat vettük figyelembe, amelyek a

$$(t_0 - \tau_1, t_0 + \tau_2)$$

időintervallumon belül érkeztek, ahol

$$120\tau_1 + 0,86\sqrt{t_0 + \tau_1} = 2r_0 \quad (34)$$

és

$$0,86\sqrt{t_0 - \tau_2} = 0,3r_0.$$

(33) és (34) alapján $\tau_1 \approx 0,6$ millisec és $\tau_2 \approx 7,3$ millisec, tehát a ködkamra felbontóképessége

$$\tau = \tau_1 + \tau_2 \approx 8 \text{ millisec}.$$

Tengerszinten a kozmikus sugárzás intenzitása körülbelül 1 ionizáló rész/cm² perc, minden vízszintesen fekvő felületen. A $W = 153 \text{ cm}^2$ felületű kamrán, 0,008 sec alatt tehát átlag 0,02 részecske haladt át, vagyis 2% a valószínűsége annak, hogy egy fényképfelvételen olyan nyomot figyeljünk meg, amely nem a KLZ-től származik. Hasonlítsuk össze az ebből származó korrekciót a mérési adatok statisztikus hibájával:

Jelölje $c(n)$ azoknak a felvételeknek a számát, amelyeken a legfelső ólomlemez felett n nyom látható és jelölje $c^*(n)$ azoknak a felvételeknek a számát, amelyeken a legfelső ólomlemez felett n olyan nyom van, amelyek mindegyike KLZ-részecskétől származik. Nyilván

$$\left. \begin{aligned} c^*(0) &\approx \frac{98}{96} c(0) \\ c^*(n) &\approx \frac{98}{96} c(n) - \frac{2}{100} \left(\frac{98}{96} \right)^2 c(n-1), \quad \text{ha } n \geq 1 \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

IIA TÁBLÁZAT

A fényképfelvételek számának $c(n)$ eloszlása a legfelső ólomlemez felett látható nyomok száma (n) szerint
(Észlelési adatok)

n	$c(n)$	n	$c(n)$	n	$c(n)$	n	$c(n)$	n	$c(n)$
0	3235	10	13	20	2	30	0	65	1
1	1569	11	12	21	0	31	3	69	1
2	806	12	14	22	5	38	1	95	1
3	383	13	6	23	4	41	1	~200	1
4	194	14	7	24	1	42	1		
5	98	15	1	25	2	45	1		
6	63	16	4	26	5	47	1		
7	26	17	4	27	1	52	1		
8	15	18	5	28	0	54	1		
9	15	19	3	29	1	61	1		

A kiértékelés közvetlen eredményeként nyert $c(n)$ értékeket a 2a táblázat tünteti fel, míg a (35) alapján számított $c^*(n)$ értékeket egész számra kikerekítve a 2b táblázat tartalmazza. Látható, hogy a korrekció a $c(0)$ érték kivételével minden esetben kisebb, mint a statisztikus hiba, a bennünket legjobban érdeklő $n \geq 12$ tartományban pedig teljesen elhanyagolható.

IIB TÁBLÁZAT

A (35) formula alapján korrigált észlelési adatok egész számra lekerekítve ($c^*(n)$)

$n =$	0	1	2	3	4	5	6	7
$c^*(n) =$	3302	1534	790	374	190	96	62	25

$c^*(n) = c(n)$, ha $n \geq 8$.

Meg kell vizsgálni azt is, hogy a ködkamra véges *térbeli* felbontóképessége miatt nem kell-e korrigálni az észleléseket, vagyis meg kell becsülni annak a valószínűségét, hogy két vagy több nyom képe a felvételen fedje egymást.

Ahhoz, hogy két különböző részecske nyoma a fényképfelvételen megkülönböztethetetlenül egybeessék, az szükséges, hogy a két részecske az érzékeny felületet kb. 1 mm²-es területen belül találja, (a kiértékelés sztereoszkopikusan történt, tehát nem elegendő az a követelmény, hogy a két nyom vetülete közti távolság 1 mm-nél kisebb legyen), s ezen kívül még az is, hogy a két részecske iránya kb. 2°-nál kisebb szöget zárjon be egymással. Vizsgáljuk meg az első feltételt. n jelentse a $W = 151$ cm² felületű kamrán áthaladó ionizáló részecskék számát. Ugyanakkora átlagsűrűségű záporokra szorítkozva n Poisson-eloszlású mennyiség. Jelentse $\langle v \rangle$

a kamra 1 mm²-nyi felületén áthaladó ionizáló részek számának várható értékét (meghatározott átlagsűrűségű záporokra szorítkozva):

$$\langle v \rangle = \frac{\langle n \rangle}{1,53 \cdot 10^4}$$

Annak a valószínűsége, hogy 1 mm²-en legalább két ionizáló rész áthaladjon:

$$1 - e^{-\langle v \rangle} - \langle v \rangle e^{-\langle v \rangle}$$

tehát a „többszörös nyomok” relatív gyakorisága, meghatározott átlagsűrűségű záporok esetén

$$\frac{1 - e^{-\langle v \rangle} - \langle v \rangle e^{-\langle v \rangle}}{1 - e^{-\langle v \rangle}} = \langle v \rangle + \text{magasabb rendű tagok.}$$

Ahhoz, hogy ez a relatív gyakoriság 1%-ot elérjen, n -nek legalább 150-nek kell lennie. 6509 felvételtől összesen egy ilyen felvétel volt. Ilyen „sűrű” felvételeken a nyomok leszámmlálása, mint arra már rámutattunk, 1%-nál sokkal bizonytalanabb. Tehát anélkül, hogy az irányok megegyezésére vonatkozó feltétellel foglalkoznánk, az eddigiek alapján is megállapíthatjuk már, hogy teljesen elhanyagolható annak a valószínűsége, hogy két különböző részecske nyoma megkülönböztethetetlenül egybeessék.

4. Az adatfeldolgozás statisztikai módszerei

A) Az eljárás elve

A (27) egyenletet $k=4$ és $S_1=S_2=S_3=S_4=S$ esetére alkalmazva felírhatjuk az n nyomot tartalmazó felvételek számának várható értékét a mérés teljes tartamára ($T=2358$ óra):

$$\langle c(n) \rangle = A \cdot B(\gamma) \cdot F(n, \gamma), \quad (36)$$

ahol

$$A = G_0 T, \quad B(\gamma) = W^\gamma \int_0^\infty \int_0^\infty (f_w)^\gamma dx_0 dy_0,$$

továbbá

$$F(n, \gamma) = \frac{(n-\gamma-1)!}{n!} \left[\int_0^\infty \int_0^\infty (f_w)^\gamma dx_0 dy_0 \right]^{-1} \int_0^\infty \int_0^\infty (f_w)^\gamma g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4; \gamma-n) dx_0 dy_0,$$

kivéve azt az esetet, mikor $\gamma n-1$ és $n+5$ közé eső egész szám, ebben az esetben ugyanis

$$F(n, \gamma) = \frac{(-1)^{\gamma+1}}{n! \gamma!} \left[\int_0^\infty \int_0^\infty (f_w)^\gamma dx_0 dy_0 \right]^{-1} \frac{d}{d\gamma} \int_0^\infty \int_0^\infty (f_w)^\gamma g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4; \gamma-n) dx_0 dy_0.$$

A többi jelölés jelentése:

$$g \equiv g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4; \gamma - n) = 1 - \sum_{i=1}^4 (1 + \alpha_i)^{\gamma-n} + \sum_{i_1, i_2} (1 + \alpha_{i_1} + \alpha_{i_2})^{\gamma-n} - \\ - \sum_{i_1, i_2, i_3} (1 + \alpha_{i_1} + \alpha_{i_2} + \alpha_{i_3})^{\gamma-n} + (1 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4)^{\gamma-n}, \\ \alpha_i = Sf_i/Wf_w \quad (i=1, 2, 3, 4),$$

$S=320 \text{ cm}^2$, $W=151 \text{ cm}^2$ és f_i (ill. f_w) az $f(r)$ oldalszerkezetfüggvény értéke a vezérlő GM csövek (ill. a ködkamra) helyén, ha a záportengely döféspontjának koordinátái x_0, y_0 .

Ha feltételezzük, hogy a KLZ-ok sűrűsége az észlelőberendezés méretein belül (tehát kb. 10 méteres szakaszon belül) nem változik lényegesen, akkor

$$\alpha_1 \cong \alpha_2 \cong \alpha_3 \cong \alpha_4 = \alpha = 2,12$$

és $F(n, \gamma)$ helyébe a jóval egyszerűbb $F^*(n, \gamma)$ írható:

$$F^*(n, \gamma) = \frac{(n-\gamma-1)!}{n!} g^* = \\ = \frac{(n-\gamma-1)!}{n!} [1 - 4(1+\alpha)^{\gamma-n} + 6(1+2\alpha)^{\gamma-n} - 4(1+3\alpha)^{\gamma-n} + (1+4\alpha)^{\gamma-n}], \quad (37)$$

ha $(n-\gamma)(n+1-\gamma)(n+2-\gamma)(n+3-\gamma)(n+4-\gamma) \neq 0$ és

$$F^*(n, \gamma) = \frac{(-1)^{\gamma+1}}{n! \gamma!} \frac{dg^*}{d\gamma} = \\ = \frac{(-1)^{\gamma+1}}{n! \gamma!} [-4(1+\alpha)^{\gamma-n} \ln(1+\alpha) + 6(1+2\alpha)^{\gamma-n} \ln(1+2\alpha) - \\ - 4(1+3\alpha)^{\gamma-n} \ln(1+3\alpha) + (1+4\alpha)^{\gamma-n} \ln(1+4\alpha)],$$

ha $(n-\gamma)(n+1-\gamma)(n+2-\gamma)(n+3-\gamma)(n+4-\gamma) = 0$.

Az A és γ ismeretlen paraméterek értékét a legnagyobb valószínűség módszerével határozzuk meg [97]:

Jelentse $P(A, \gamma; c(r), c(r+1), \dots, c(r+s))$ annak a valószínűségét, hogy a $\langle c(r) \rangle, \langle c(r+1) \rangle, \dots, \langle c(r+s) \rangle$ értékek helyett éppen a (valóban észlelt) $c(r), c(r+1), \dots, c(r+s)$ felvételszámokat észleljük. r és $r+s$ két tetszőlegesen megválasztott nyom-szám. A legnagyobb valószínűség módszere szerint A és γ mért értékének azt az $(\bar{A}, \bar{\gamma})$ értékpárt tekintjük, amelyre nézve a P valószínűség a legnagyobb. Kivételes esetektől eltekintve ez az értékpár a

$$\frac{\partial \ln P}{\partial A} = 0, \quad \frac{\partial \ln P}{\partial \gamma} = 0 \quad (38)$$

egyenletrendszer gyökeivel azonos. Az így meghatározott \bar{A} , $\bar{\gamma}$ értékek statisztikus hibája a következő kifejezések alapján számítható [97]:

$$(\delta \bar{A})^2 = -\frac{\langle P_{\gamma\gamma} \rangle}{\langle P_{AA} \rangle \langle P_{\gamma\gamma} \rangle - \langle P_{A\gamma} \rangle^2}, \quad (39a)$$

$$(\delta \bar{\gamma})^2 = -\frac{\langle P_{AA} \rangle}{\langle P_{AA} \rangle \langle P_{\gamma\gamma} \rangle - \langle P_{A\gamma} \rangle^2}, \quad (39b)$$

ahol a következő jelöléseket alkalmaztuk:

$$P_{AA} = \frac{\partial^2 \ln P}{\partial A^2}, \quad P_{A\gamma} = \frac{\partial^2 \ln P}{\partial A \partial \gamma}, \quad P_{\gamma\gamma} = \frac{\partial^2 \ln P}{\partial \gamma^2}.$$

Legyen továbbá

$$P_A = \frac{\partial \ln P}{\partial A} \quad \text{és} \quad P_\gamma = \frac{\partial \ln P}{\partial \gamma},$$

A P valószínűség a következőképpen határozható meg:

Az adott számú nyomot tartalmazó fényképfelvételek száma Poisson-eloszlású mennyiség, tehát

$$\frac{\langle c(n) \rangle^{c(n)}}{c(n)!} e^{-\langle c(n) \rangle}$$

a valószínűsége annak, hogy $c(n)$ helyett éppen $c(n)$ -t észleljünk. A különböző számú nyomot tartalmazó felvételek száma független egymástól, tehát annak a valószínűsége, hogy éppen a $c(r)$, $c(r+1)$, ..., $c(r+s)$ sorozatot észleljük:

$$P(A, \gamma; c(r), \dots, c(r+s)) = \prod_{n=r}^{r+s} \frac{\langle c(n) \rangle^{c(n)}}{c(n)!} e^{-\langle c(n) \rangle}. \quad (40)$$

(A továbbiakban minden szorzás és összegezés $n=r$ -től $n=r+s$ -ig terjed, ezeket a határokat áttekinthetőség kedvéért nem fogjuk kiírni.)

(40) alapján a (38) egyenletrendszer a következő alakba írható:

$$P_A \equiv \sum \left(\frac{c(n)}{\langle c(n) \rangle} - 1 \right) \frac{\partial \langle c(n) \rangle}{\partial A} = 0, \quad (41a)$$

$$P_\gamma \equiv \sum \left(\frac{c(n)}{\langle c(n) \rangle} - 1 \right) \frac{\partial \langle c(n) \rangle}{\partial \gamma} = 0. \quad (41b)$$

(36) alapján

$$\frac{\partial \langle c(n) \rangle}{\partial A} = B(\gamma) \cdot F(n, \gamma)$$

és

$$\frac{\partial \langle c(n) \rangle}{\partial \gamma} = \langle c(n) \rangle \left[\frac{B'(\gamma)}{B(\gamma)} + \frac{F'(n, \gamma)}{F(n, \gamma)} \right],$$

ahol a vessző γ szerinti deriválást jelent. (41a) alapján

$$\bar{A} = \frac{\Sigma c(n)}{B(\bar{\gamma}) \Sigma F(n, \bar{\gamma})}, \quad (42a)$$

amit (41b)-be beírva $\bar{\gamma}$ meghatározására a következő egyenletet nyerjük:

$$[P_\gamma]_{\gamma=\bar{\gamma}} \equiv \frac{d}{d\bar{\gamma}} \{ \Sigma [c(n) \ln F(n, \bar{\gamma})] - [\Sigma c(n)] \ln \Sigma F(n, \bar{\gamma}) \} = 0. \quad (42b)$$

$\bar{\gamma}$ statisztikus hibájának becslése céljából a második deriváltakat kell kiszámítani: A független változók feltüntetetésének elhagyásával

$$P_{AA} = - \frac{\Sigma c(n)}{A^2}$$

$$P_{A\gamma} = - \Sigma (B' F + B F')$$

$$P_{\gamma\gamma} = \Sigma c(n) \frac{d}{d\gamma} \left(\frac{B'}{B} + \frac{F'}{F} \right) - A \Sigma (B'' F + 2B' F' + B F''),$$

tehát

$$\langle P_{AA} \rangle = - \frac{B}{A} \Sigma F$$

$$\langle P_{A\gamma} \rangle = - B' \Sigma F - B \Sigma F'$$

$$\langle P_{\gamma\gamma} \rangle = - AB \Sigma F \left(\frac{B'}{B} + \frac{F'}{F} \right)^2$$

s így

$$\langle P_{AA} \rangle \langle P_{\gamma\gamma} \rangle - \langle P_{A\gamma} \rangle^2 = B^2 \left[\Sigma F \Sigma \frac{F'^2}{F} - (\Sigma F')^2 \right],$$

tehát (39b) és (36) alapján

$$(\delta\bar{\gamma})^2 = \frac{1}{\langle \Sigma c(n) \rangle} \cdot \frac{(\Sigma F)^2}{\Sigma F \Sigma \frac{F'^2}{F} - (\Sigma F')^2}. \quad (43)$$

$B(\gamma)$ nem szerepel sem $\bar{\gamma}$ meghatározó egyenletében (42b), sem $\delta\bar{\gamma}$ kifejezésében (43), tehát $\bar{\gamma}$ és $\delta\bar{\gamma}$ értéke ugyanaz maradt volna akkor is, ha $C_0 T$ helyett $C_0 T B(\gamma)$ -t jelöltük volna A -val és nem vettük volna figyelembe az ily módon definiált A -nak γ -tól való függését.

B) Az eljárás gyakorlati végrehajtása

A numerikus kiértékeléskor kihagytuk azokat a felvételeket, amelyeken egyetlen nyom sem volt látható ($n=0$).

Célunk a nagy sűrűségű (nagy részecseszámú) záporok vizsgálata volt, az $n=0$ záporok pedig nyilván az általunk észlelt legritkább (legkisebb részecseszámú) záporok voltak, figyelmen kívül hagyásuk tehát a mérés célja szempontjából nem jelentett hátrányt, figyelembevételük azonban szisztematikus hibát okozhatott volna a következő oknál fogva:

A felvételek egy kis hányadán (kb. 2%-án) az expanzióviszony lassú változása miatt a nyomok csak alig voltak láthatók. Az ilyen felvételeket nem vettük figyelembe. Ez nem befolyásolja $\bar{\gamma}$ értékét — ha $\bar{\gamma}$ értékét csak az $n \geq 1$ felvételekből állapítjuk meg —, mert e hiba folytán valamennyi $c(n)$, ($n \geq 1$) érték ugyanabban az arányban változik meg. Valószínű azonban, hogy a felvételeknek nagyságrendileg ugyancsak mintegy 2%-án egyáltalán nem látszottak nyomok, azért, mert az expanzióviszony megváltozott; ez azonban egy felvételtől — ha nincs rajta nyom — nem állapítható meg, tehát az $n=0$ felvételek számában ismeretlen nagyságú szisztematikus hiba lehetséges.

A $c(n)$ ($n=1, 2, 3, \dots$) észlelési adatokat három csoportba soroltuk:

1. $c(1), c(2), c(3)$ vagyis $r=1, s=2$
2. $c(4), c(5), \dots, c(11)$ vagyis $r=4, s=7$
3. $c(12), c(13), \dots$ vagyis $r=12, s=\infty$.

A kiértékelést (vagyis a (42b) egyenlet megoldását és a (43) hibakifejezés kiszámítását) mindhárom csoportra nézve külön-külön hajtottuk végre, ily módon három olyan $\bar{\gamma}$ értéket (és hozzátartozó statisztikus hibákat) határoztunk meg, amelyek a) egymástól statisztikusan függetlenek és b) legnagyobbbrészt különböző részecskeszámú záporokra vonatkoznak.

Az említett három esetben kívül, a kiértékelést még egy negyedik módon is elvégeztük:

4) $c(1), c(2), \dots$, vagyis $r=1, s=\infty$, azaz valamennyi észlelési adatot egy csoportba sorolva.

A (36) egyenletbe $F(n, \gamma)$ helyett annak közelítő alakját $F^*(n, \gamma)$ -t (37) írtuk. Az ezzel elkövetett hiba a bennünket leginkább érdeklő 3. tartományban ($12 \leq n < \infty$) bizonynyal elhanyagolható, mert még a sokkal erősebb $g^*(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4; \gamma - n) \cong 1$ közelítés is megengedhető. Ugyanis $\alpha_1 \cong \alpha_2 \cong \alpha_3 \cong \alpha_4 = \alpha = 2,12$ mellett a legkedvezőtlenebb esetben ($n=12$) is $1 - g^* \cong 3 \cdot 10^{-5}$.

Ebből egyúttal az is következik, hogy a II. 3. C. pontban megkövetelt feltételek teljesülnek, s az így meghatározott $\bar{\gamma}$ érték nem függ az észlelőberendezés geometriai elrendezésétől és a számspektrum kitevőjét szolgáltatja.

A (42b) egyenlet megoldása ($\bar{\gamma}$ számítása) numerikus úton, elektronikus számológéppel (Elliot 803) történt, 0,0001-nél kisebb hibával, (ami $\bar{\gamma}$ statisztikus hibájánál legalább két nagyságrenddel kisebb). Ugyancsak elektronikus számológéppel történt $\delta\bar{\gamma}$ kiszámítása is, a (43) összefüggés alapján. A számításokat mind a korrigálatlan, mind pedig a (35) alapján korrigált mérési adatokkal elvégeztük. Az eredmények eltérése lényegtelen (kisebb mint a statisztikus hiba, l. 3a táblázat).

A (43) összefüggés $\bar{\gamma}$ hibájának csak azt a részét adja meg, amely a záporok oldalszerkezetének Poisson-fluktuációja következtében lép fel. $\bar{\gamma}$ -nak ezen kívül még két hibaforrása lehet: a) W értékének bizonytalansága, b) n értékének mérési hibája. E hibaforrások hatásának becslése a következőképpen történt.

a) Abból a célból, hogy megállapítsuk, mennyire függ a spektrum kitevőjének mért értéke a ködkamra érzékeny felületének mért értékétől, a mérési adatok kiértékelését két erősen különböző W értékkel is elvégeztük, és pedig a $W_1 = 150 \text{ cm}^2$ és $W_2 = 165 \text{ cm}^2$ értékekkel, ezek különbsége W mérési bizonytalanságának kétszerese. Az eredményeket a 3a és 3b táblázat tünteti fel. A legnagyobb részecskeszámú záporok tartományában (3. csoport, $n \geq 12$) mindössze 3% az eltérés a két különböző W -vel számított két $\bar{\gamma}$ érték között, ami esetünkben teljesen elhanyagol-

IIIA TÁBLÁZAT

A kiterjedt légizáporok számspektrumának kitevője különböző részecseszám-tartományokban.
 $W = 150 \text{ cm}^2$ -el számolva

Csoport sorszám	n	$\Sigma c(n)$	$\Delta_n = n/w$	$\Delta_{0,05}$	$\Delta_{0,95}$	$\Delta_{0,50}$	Δ_{\max}	$N_{0,05}$	$N_{0,95}$	$N_{0,50}$	N_{\max}	$\bar{\gamma}$
			részecske/m ²					összrészecseszám				
1	$1 \leq n \leq 3$	2758	$67 \leq \Delta_n \leq 200$	20	210	67	47	$\sim 2 \cdot 10^5$	$\sim 2 \cdot 10^6$	$\sim 7 \cdot 10^5$	$\sim 5 \cdot 10^5$	$1,48 \pm 0,07$
2	$4 \leq n \leq 11$	436	$270 \leq \Delta_n \leq 730$	67	570	200	130	$\sim 7 \cdot 10^5$	$\sim 6 \cdot 10^6$	$\sim 2 \cdot 10^6$	$\sim 1 \cdot 10^6$	$*1,83 \pm 0,13$
3	$12 \leq n < \infty$	80	$800 \leq \Delta_n \leq 13000$	500	4100	930	800	$\sim 5 \cdot 10^6$	$\sim 4 \cdot 10^7$	$\sim 9 \cdot 10^6$	$\sim 8 \cdot 10^6$	$1,69 \pm 0,27$
4	$1 \leq n < \infty$	3274	$67 \leq \Delta_n \leq 13000$	21	410	76	41	$\sim 2 \cdot 10^5$	$\sim 4 \cdot 10^6$	$\sim 8 \cdot 10^5$	$\sim 4 \cdot 10^5$	$1,55 \pm 0,03$

* Ha a korrigált mérési adatok (2b táblázat) alapján számolunk, akkor a *-gal jelölt $\bar{\gamma}$ érték helyett $\bar{\gamma} = 1,81 \pm 0,13$ lesz az eredmény, a többi $\bar{\gamma}$ érték változatlan.

IIIB TÁBLÁZAT

A kiterjedt légizáporok számspektrumának kitevője különböző részecseszám-tartományokban.
 $W = 165 \text{ cm}^2$ -el számolva

Csoport sorszám	n	$\Sigma c(n)$	$\Delta n = n/w$	$\Delta_{0,05}$	$\Delta_{0,95}$	$\Delta_{0,50}$	Δ_{\max}	$N_{0,05}$	$N_{0,95}$	$N_{0,50}$	N_{\max}	γ
			részecske/m ²					összrészecseszám				
1	$1 \leq n \leq 3$	2758	$60 \leq \Delta_n \leq 180$	15	120	52	38	$\sim 2 \cdot 10^5$	$\sim 1 \cdot 10^6$	$\sim 5 \cdot 10^5$	$\sim 4 \cdot 10^5$	$1,60 \pm 0,07$
2	$4 \leq n \leq 11$	436	$240 \leq \Delta_n \leq 670$	55	460	176	120	$\sim 6 \cdot 10^5$	$\sim 5 \cdot 10^6$	$\sim 2 \cdot 10^6$	$\sim 1 \cdot 10^6$	$1,86 \pm 0,13$
3	$12 \leq n < \infty$	80	$730 \leq \Delta_n \leq 12000$	430	3900	900	790	$\sim 4 \cdot 10^6$	$\sim 4 \cdot 10^7$	$\sim 9 \cdot 10^6$	$\sim 8 \cdot 10^6$	$1,64 \pm 0,26$
4	$1 \leq n < \infty$	3274	$60 \leq \Delta_n \leq 12000$	15	170	60	38	$\sim 2 \cdot 10^5$	$\sim 2 \cdot 10^6$	$\sim 6 \cdot 10^5$	$\sim 4 \cdot 10^5$	$1,63 \pm 0,03$

ható $\bar{\gamma}$ statisztikus hibája mellett. Valamivel kedvezőtlenebb a helyzet az 1. csoportban, ahol W értékének bizonytalansága jobban érvényesül: a két $\bar{\gamma}$ érték 8%-os eltérést mutat, ami a statisztikus hibának körülbelül 1,8-szorosa. Mérésünk célja a nagy részecskeszámú záporok spektrumának mérése volt; ennek kitevőjét, mint láttuk, W bizonytalanságának kétszerese sem befolyásolja érezhetően.

b) A felvételeken észlelt nyom-számok (n) mérési hibájának hatását a következőképpen vizsgáltuk meg: Feltételeztük, hogy valamennyi nyom-számot 10%-kal kevesebbnek számoltuk a valódinál, a legsűrűbb felvételen pedig 20%-kal kevesebbnek vagy többnek. Ennek megfelelően kiszámítottuk — a GM csövek teljes telítését feltételezve — a következő két egyenlet megoldását:

$$\frac{d}{d\bar{\gamma}'} \left[\sum_{n=12}^{199} \{c(n) \ln F(1, 1n; \bar{\gamma}')\} + c(200) \ln F(240, \bar{\gamma}') - \left\{ \sum_{n=12}^{\infty} c(n) \right\} \ln \sum_{n=13}^{\infty} F(n, \bar{\gamma}') \right] = 0 \quad (44a)$$

és

$$\frac{d}{d\bar{\gamma}''} \left[\sum_{n=12}^{199} \{c(n) \ln F(1, 1n; \bar{\gamma}'')\} + c(200) \ln F(160, \bar{\gamma}'') - \left\{ \sum_{n=12}^{\infty} c(n) \right\} \ln \sum_{n=13}^{\infty} F(n, \bar{\gamma}'') \right] = 0. \quad (44b)$$

Az eredmények a következők:

$$|\bar{\gamma} - \bar{\gamma}'| < 0,01 \quad \text{és} \quad |\bar{\gamma} - \bar{\gamma}''| < 0,01,$$

tehát a mért n értékekben elkövetett 10%-os szisztematikus hiba még akkor sem okoz észrevehető változást $\bar{\gamma}$ -ban, ha a legsűrűbb felvételen ellenkező irányú 20%-os hibát tételezünk fel.

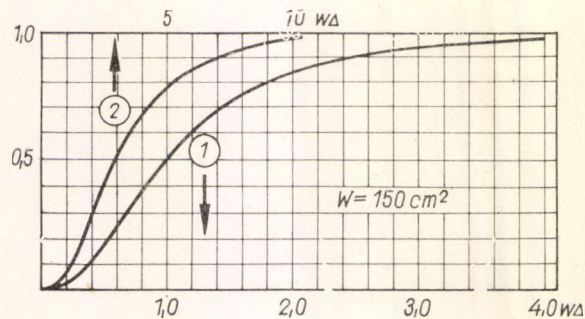
Ha azt tételezzük fel, hogy csak az $n \geq 50$ felvételek kiértékelésénél követtünk el 10%-os szisztematikus hibát, akkor $\bar{\gamma}$ értékében 0,02 a változás. Láthatjuk tehát, hogy $\bar{\gamma}$ értéke nem nagyon érzékeny a nyomok számában elkövetett hibákra.

5. Eredmények: a számspektrum alakja, a mérési tartomány becslése

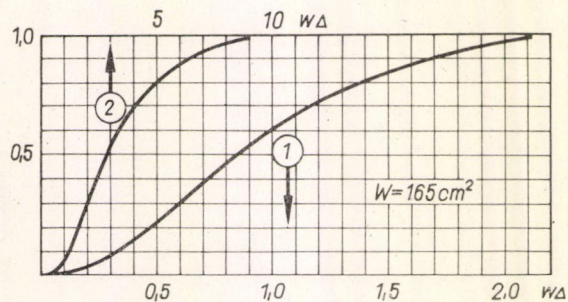
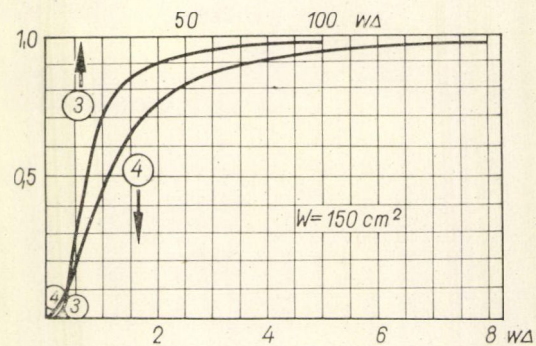
Mérési tartományon értjük azt a sűrűségtartományt (ill. részecsketartományt), amelybe az észlelt záporok túlnyomó többségének (megállapodásunk szerint 90%-ának) sűrűsége (ill. összrészecskeszáma) beleesik.

A mérési sűrűségtartományok becslését a II. 4. pont (31a) egyenlete alapján hajtottuk végre, vagyis grafikusán ábrázoltuk a

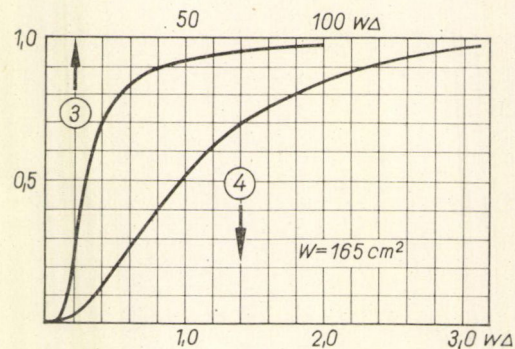
$$p^*(A) = \frac{1}{\langle \Sigma c(n) \rangle} \sum \int_0^A H_0 A^{-\gamma^*-1} (1 - e^{-SA'})^4 \frac{(WA')^n}{n!} e^{-WA'} dA' \quad (45)$$



10a-b ábra: A p^* (Δ) függvény menete $W = 150 \text{ cm}^2$ mellett (1. (45) egyenlet)



10c-d ábrák: A p^* (Δ) függvény menete $W = 165 \text{ cm}^2$ mellett (1. (45) egyenlet)



függvényt. A négy különböző csoportnak ($1 \leq n \leq 3$; $4 \leq n \leq 11$; $12 \leq n < \infty$; $1 \leq n < \infty$) megfelelő grafikonok a 10a)—d) ábrákon láthatók. A (45)-ben szereplő integrálokat elektronikus számológéppel numerikusan számítottuk, körülbelül 5—10% pontossággal. A $p^*(\Delta_{0,05})=0,05$ ill. $p^*(\Delta_{0,95})=0,95$ -el definiált „90%-os tartomány” határait (vagyis $\Delta_{0,05}$ -öt és $\Delta_{0,95}$ -öt), a $p^*(\Delta_{0,50})=0,50$ összefüggéssel definiált medián ($\Delta_{0,50}$) értékét, valamint a (45) integrál alatti kifejezés maximumának helyét (Δ_{MAX}) a 3a. és a 3b. táblázat tünteti fel.

Mint látszik, ezek a tartományok erősen eltérnek a $\Delta = n(W$ -vel (nyomok száma osztva a ködkamra érzékeny felületével) definiált „névleges átlagsűrűség”-től: ez utóbbiak használata tehát helytelen volna.

A részecskeszám-tartományokat, mint arra már a II. 4. részben rámutattunk, csak hozzávetőlegesen lehet becsülni. Az ott megadott (32a) összefüggés alapján számított részecskeszám-tartományokat ugyancsak a 3a és 3b táblázat tünteti fel.

Mérésünk végeredménye tehát a következőkben foglalható össze:

a) A sűrűség spektrum kitevője nem mutat hirtelen emelkedő tendenciát nagy sűrűségek ($\Delta_{\text{atl}} > 500$ részecske m^{-2}) esetén sem.

b) Háromszoros statisztikus hibát megengedve sem lehet 2,50-nél nagyobb a kitevő.

c) Minthogy [87, 88] szerint a záporok oldalszerkezete egy-két részecskeszám-nagyságrenden belül független a részecskeszámtól, azért az a) és b) alatti eredmények érvényesek a számspektrum kitevőjére is.

6. Más szerzők mérései

Mint már a Bevezetésben említettük, az eddig végzett mérések nem tették lehetővé egyértelműen annak eldöntését, hogy a KLZ-ok számspektrumának (sűrűség spektrumának) alakja megváltozik-e nagy részecskeszámú (sűrűségű) KLZ-ok esetében. Az 1. táblázatól kitűnik, hogy a mérések egy része szerint a kitevő csak lassan növekszik és $N \cong 10^7$ részecskeszámnál ($\cong 5 \cdot 10^3$ rész m^{-2} átlagsűrűségnél) is csak $\gamma = 1,9$ körüli értéket ér el.*

Ez az érték is nagyobb azonban annál, mint amit akár a Cocconi [58], akár a Zawadzki [59], akár a Greisen [60] formula szolgáltat γ -ra ebben a részecskeszám (sűrűség-) tartományban és az eltérés szignifikáns, ha a [64—68] mérések végeredményének súlyozott átlagát vesszük és az [58—60] formulák hibáját elhanyagoljuk e mellett. Az [58—60] formulákat azonban kisebb részecskeszám (sűrűség-) tartományokra állapították meg, extrapolációjuk tehát nem tekinthető olyan pontosnak, mint az eredeti tartományban szolgáltatott értékeik. Az [58—60] formulák csekély módosításával a [64—68] eredmények is beilleszthetők abba az általános képbe, hogy a spektrum kitevője lassan (nagyjából logaritmikusan) nő.

* Az 1a táblázat alapján, a [21], [61], [62], [63] mérések eredményét figyelmen kívül hagyva, az $N \lesssim 3 \cdot 10^6$ részecskeszámú záporok számspektrumának kitevője

$$\gamma = 1,89 \pm 0,04$$

A 0,04 adat pusztán a statisztikus jellegű hibákat öleli fel.

Egy másik felfogás szerint azonban a számspektrum (sűrűségpektrum) kitevője „hirtelen” növekszik meg $N \cong 10^6$ ($\cong 5 \cdot 10^2$ rész m^{-2}) körül, sőt az irodalomban gyakran beszélnek a spektrum „töréséről”, „könyökéről”, „letöréséről” s a mérési eredmények grafikonjába gyakran rajzolnak (log-log ábrázolásmódban) két közös végpontú, nem egy egyenesben fekvő félegyenest; a közös végpont helyét nevezik a „törés” helyének (11. ábra). Ilyen értelmezésre azonban nincs semmiféle bizonyíték. Ahhoz, hogy ilyen „törés” létezését kimutassuk, azt kell igazolni, hogy

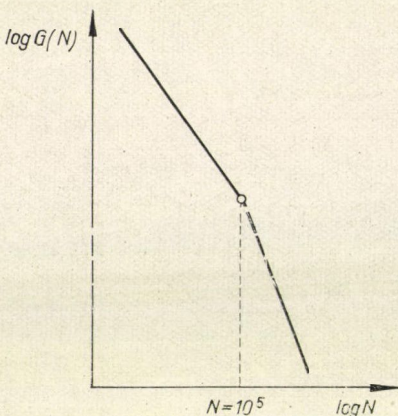
$$\frac{d^2 \ln G(N)}{d(\ln N)^2} = 0 \quad \text{ha} \quad N \gtrless N_0, \quad (46a)$$

de

$$\frac{d^2 \ln G(N)}{d(\ln N)^2} \neq 0 \quad \text{ha} \quad N = N_0. \quad (46b)$$

A sűrűségpektrum esetében $G(N)$ helyett $H(\Delta)$ és N_0 helyett Δ_0 írandó. $G(N)$ és $H(\Delta)$ definícióját 1° , a (3) ill. az (5) egyenlettel kapcsolatban. Vegyük figyelembe, hogy

$$\frac{d \ln G(n)}{d \ln N} = -\gamma - 1.$$



11. ábra

Tehát tulajdonképpen második differenciák zérussá válását illetőleg zérustól való különbözőségét kellene kimutatni. Köztudomású, hogy ehhez nagyon nagy pontosságú mérések szükségesek és az 5. ábrára való rátekintés meggyőző arról, hogy a (46) hipotézis nem tekinthető bizonyítottnak: a (46)-tal ellenkező hipotézis, vagyis γ -nak állandó, lassú változása nem zárható ki még akkor sem, ha $N \cong 10^7$ táján olyan nagy γ értéket engedünk meg mint pl. $\gamma = 2,9$. A $\gamma(N)$ függvény alakjának meghatározásához (vagyis a második differenciák pontos ismeretéhez) az eddigiek-nél mintegy egy nagyságrenddel pontosabb mérések lennének szükségesek.

A mérések jelenlegi állása mellett mindössze annyi dönthető el, hogy a $\gamma \approx 1,9$ hipotézis $N \gtrless 10^6$ ($\Delta \gtrless 5 \cdot 10^2 m^{-2}$) esetén is fennál-e vagy sem. Mérésünk ennek eldöntését célozta.

A $\gamma \approx 1,9$ ($N \gtrless 10^6$, $\Delta \gtrless 5 \cdot 10^2 m^{-2}$) hipotézis mellett szólnak a kioldó számlálócsöves mérések [55a, 69] és az óriásberendezésekkel végzett közvetlen számspektrum-mérések [64–68]. Az ellene szóló mérések között szokás felhozni *Norman* proporcionális számlálókkal végzett mérését [63] és *Prescott* impulzus-ionizációs-kamrákkal végzett mérését [62]. Ezek azonban tulajdonképpen nem cáfolnak semmit, mert a) *Norman* nem adja meg mérésének statisztikus hibáját, tehát adatát ($\gamma = 2,2$) nem lehet felhasználni semmiféle hipotézis igazolására vagy elvetésére, b) *Prescott* adata ($\gamma = 2,4 \pm 0,4$) kétszeres statisztikus hibán belül összefér akár a $\gamma = 1,6$ akár a $\gamma = 3,2$ hipotézissel is.

Részletesebben kell foglalkoznunk azonban *Reid*, *Gopaulsingh*, *Page*, *Idnurm*, *McCusker*, *Malos*, *Millar*, és *Winterton* mérésével [61]. A mérés a világ három különböző táján (Dublinben, Jamaica szigetén és Sydney-ben) történt, három különböző berendezéssel. A mérési adatokat összesítve dolgozták fel.

A dublini berendezés a következő részekből állt:

a) Két ködkamra, az első érzékeny felülete $30 \times 8 = 240 \text{ cm}^2$, a másiké $30 \times 12 = 360 \text{ cm}^2$. A kiértékelés során csak az utóbbit vették figyelembe.

b) Három GM cső, érzékeny felületük egyenként $18,3 \text{ cm}^2$, 20 cm oldalhosszúságú vízszintes síkban fekvő egyenlőoldalú háromszög csúcsaiban elhelyezve, hármas koincidenciába kapcsolva. Távolságuk a ködkamráktól kevesebb mint 1 m .

c) Két áthatoló zápor-berendezés: mindegyik három GM cső-sorból állt (felületük egyenként 2500 cm^2), ezek egymás alatt voltak elhelyezve, a legfelső és a legalsó sor között összesen 35 cm ólom abszorbenssel. Mindkét áthatolózápor-berendezés csak akkor adott kimenő jelet, ha mindhárom csősorban legalább két-két számlálócső megszólalt. Az áthatolózápor-berendezés távolsága a ködkamráktól 5 m .

d) 2500 cm^2 felületű számlálócsősor, abszorbens nélkül, távolsága a ködkamráktól 5 m , az áthatolózápor-berendezéstől 2 m .

e) Egyéb számlálócső-sorok, melyek azonban a nagysűrűségű záporokra vonatkozó mérésekben nem szerepeltek.

A ködkamrákat a három kis GM cső, a két áthatolózápor berendezés közül legalább az egyiknek kimenő jele és a nagyfelületű GM csősor jele közti ötös koincidencia vezérelte.

A jamaicai berendezés ugyanezekből a részletekből állt, azonban a ködkamrák felülete egyenként $30 \times 18 = 540 \text{ cm}^2$ volt. Nem említik, hogy a két különböző kamrával nyert adatokat hogyan egyesítették.

A sydneyi berendezés több tekintetben különbözött az első kettőtől, és pedig

a) a ködkamrák felülete 1000 cm^2 és 1100 cm^2 volt,

b) a három, $18,3 \text{ cm}^2$ felületű GM cső az egyik ködkamra tetejére volt helyezve,

c) nem volt áthatoló zápor-berendezés,

d) a lefedetlen GM csősor felülete 2000 cm^2 volt és 2 m távolságban volt a ködkamráktól.

A [61]-ben közzétett adatok szerint a három különböző készülékkel összesen 231 olyan záport észleltek, amelyek a ködkamrákban $800/\text{m}^2$ -nél nagyobb részecske-sűrűséget eredményeztek, ezek megoszlását azonban nem közölték.

A kiértékelés során az áthatoló záporberendezés és a lefedetlen nagyfelületű GM csősor hatását elhanyagolták. A γ paraméter legjobb értékét úgy határozták meg, hogy elektronikus számológép segítségével különböző n értékekre számították az

$$\int H_0 A^{-\gamma-1} (1 - e^{-sA})^3 \frac{(WA)^n}{n!} e^{-WA} dA$$

kifejezés értékét $s \chi^2$ próba segítségével megkeresték azt a $\gamma = \bar{\gamma}_m$ értéket, amelyre nézve a legnagyobb ($P = P_m$) annak a valószínűsége, hogy az észlelt és számított adatok eltérése pusztán statisztikus fluktuáció eredménye.

Eredményük a következő: $n/W > 1100$ részecske/ m^2 sűrűségű felvételek kiértékelése alapján (ezek számát nem közlik)

$$\bar{\gamma}_m = 2,9 \quad P_m = 0,24$$

Egyéb paraméterértékek mellett a következő P valószínűségeket találták arra,

hogyan a számított és mért értékek eltérése csakis statisztikus fluktuáció következménye legyen:

$$\bar{\gamma} = 2,4 \quad P = 0,05$$

$$\bar{\gamma} = 2,0 \quad P = 0,004$$

$$\bar{\gamma} = 1,5 \quad P < 10^{-6}$$

$\bar{\gamma}_m$ standard hibáját nem adták meg; a [61] cikkben a végeredményt $\bar{\gamma}_m = 2,9 \pm 0,5$ alakban írták fel, azzal a megjegyzéssel, hogy a 0,5 eltérés a $P = 0,05$ valószínűségnek megfelelő határ. A $P = 0,05$ határ azonban nem jellemzi kielégítően a mérés pontosságát. $\bar{\gamma}_m$ standard hibája a fenti $(\bar{\gamma}, P)$ adatpárokból közelítőleg meghatározható, eredményül $\delta\bar{\gamma}_m \approx 0,3$ körüli érték adódik. Tehát a [61] mérés végeredménye

$$\bar{\gamma}_m = 2,9 \pm 0,3$$

E szerint tehát a KLZ-ok sűrűség spektruma (és — ha az oldalszerkezet e nagy sűrűségeken is független a primer energiától — akkor a számspektrum is) nagy sűrűségeken igen meredekké válik.

A tényleges helyzet ma a következő:

1. A [61], [62] és a [63] mérést, valamint saját mérésünket leszámítva, a többi mérés, amit $N \gtrsim 10^6$ részecskeszámok mellett végeztek, a következő összesített eredményt adja a KLZ-ok számspektrumának (sűrűség spektrumának) kitevőjére:

$$\bar{\gamma} = 1,89 \pm 0,04.$$

2. A [63] mérést nem vehetjük figyelembe, mert nem közli a végeredmény statisztikus hibáját. A [61] és [62] mérések egyesített eredménye szerint

$$\bar{\gamma} = 2,72 \pm 0,24.$$

3. Saját mérésünk végeredménye

$$\bar{\gamma} = 1,69 \pm 0,27$$

összhangban van az 1. alatti értékkel.

A [61], [62], [63] mérések más módszereket alkalmaztak mint az 1. alapjául szolgáló mérések, ezért az 1. és 2. alatti eredmények eltérése fizikailag értelmezhető lett volna: A záporok oldalszerkezetének függése a zápor összrészecskeszámától, (vagyis a záport elindító primer rész energiájától) okozhat ilyen eltéréseket s az oldalszerkezet energiafüggéséből az elemi kölcsönhatások természetének energiafüggésére lehetett volna következtetni. Merészebb gondolkodók egyszerűen figyelmen kívül hagyták az 1. alatti eredményt és γ növekedését a primer energia-spektrum „letörésének” vagy a primer sugárzás töltés szerinti összetétele energiafüggésének tulajdonították [98]. A 3. eredmény azonban nem enged meg ilyen értelmezéseket, legalábbis korlátot szab az elemi kölcsönhatás vagy a primer sugárzás-összetétel energiafüggésének. Ezekkel a kérdésekkel a IV. fejezetben foglalkozom részletesebben. Ezen a helyen a 2. és a 3. alatti mérések eltéréseinek lehetséges okait keresem.

A [61] mérés és saját mérésünk is ködkamrával, tehát a legpontosabb sűrűségbecslő berendezéssel történt. Mindkét mérés tengerszinten történt. (Dublin, Jamaica — azaz valószínűleg Kingston, Sydney kb. 100 m tengerszintfeletti magasságon

fekszik, a budapesti mérés 410 m tengerszintfeletti magasságban történt. Az eltérés elhanyagolható.) Az eltérések a ködkamra vezérlésében álltak fenn:

1. A [61] mérésben (a sydneyi rész kivételével) áthatolózápor-berendezés megszólalását is megkövetelték. Ennek hatását nagyon nehéz figyelembe venni: ehhez mindenekelőtt ismerni kellene a KLZ-ok magaktív- és műon-komponenseinek oldalirányú sűrűségeloszlását: ezeket jóval kevésbé pontosan ismerjük, mint az elektron-komponensét. Ezen túlmenően, rendkívül bonyolult matematikai feladat lenne ennek figyelembevétele $c(n)$ megállapításában.

A szerzők teljesen elhanyagolták az áthatolózápor-berendezés befolyását azzal az indokolással, hogy kiegészítő méréseik alapján mindössze 6%-nak találták annak a valószínűségét, hogy egyik áthatolózápor-berendezés se szólaljon meg, ha a teljes berendezést 800 rész/m^2 -nél nagyobb átlagsűrűségű zápor éri.

Ez a 6% azonban nem elhanyagolható mennyiség, mert ez a 6% csak átlagérték; a $800\text{—}1000 \text{ rész/m}^2$ sűrűségű záporokból — az áthatolózápor-berendezések meg nem szólalása miatt — nyilván jóval *több* mint 6% esik ki, míg a $2000\text{—}3000 \text{ rész/m}^2$ sűrűségű záporokból jóval *kevésbé* mint 6%, az ennél nagyobb sűrűségű záporokból pedig gyakorlatilag valószínűleg *semmi*. Az áthatolózápor-berendezések hatásának elhanyagolása tehát ismeretlen nagyságú szisztematikus hibát hoz be a [61] mérésbe.

Nem valószínű, hogy a [61] mérés szokatlanul nagy γ értéke az áthatolózápor-berendezések hatásának elhanyagolásától származnék, mert — kvalitatív megítélés szerint — az áthatolózápor-vezérlés figyelembevétele még tovább növelné a γ -ra kapott értéket.

A [61] mérésben az áthatolózápor-készülékeknek semmi szerepük nem volt, csak zavarták a mérést. A teljes berendezés nyilván más célokra, valószínűleg a KLZ magaktív komponensének vizsgálatára is szolgált egyidejűleg, s ehhez volt szükség az áthatolózápor-készülékre. A problémát úgy kellett volna megoldani, hogy az a ködkamrákat egyidejűleg kétféleképpen kellett volna vezérelni: a) a három kis GM cső hármaskoincidencia-jelével b) az áthatolózáporokat figyelembe vevő ötös koincidencia-jellel; gondoskodni kellett volna a kétféle vezérlési módnak a ködkamrafelvételeken történő megjelöléséről, s a sűrűség spektrum megállapításához csak az a) vezérléssel észlelt felvételeket kellett volna figyelembe venni.

2. A [61] mérésben a vezérlő jel kialakításában szerepet játszott egy nagyfelületű GM csősor is, aminek hatását a kiértékelésnél elhanyagolták. Ez jogosult, mert a szóban forgó felületekre $800/\text{m}^2$ sűrűségű záporok esetén átlag 200 részecske esett, tehát bizonyos, hogy megszólaltak.

3. A [61] mérésben szereplő ködkamrákat lényegében véve a három kis GM cső koincidencia-jele vezérelte. Ez a vezérlési mód lényegesen különbözött a mi kísérletünkben alkalmazott vezérléstől három tekintetben is:

a) A [61] mérésben a vezérlő csövek nagyon közel voltak egymáshoz (20 cm oldalhosszúságú egyenlőoldalú háromszög csúcsaiban; a mi mérésünkben a vezérlő GM csövek egy $9 \times 10 \text{ m}^2$ -es téglalap csúcsaiban voltak elhelyezve). Három, egymástól 20 cm-re fekvő számlálócsövet azonban megszólaltathat három olyan részecske is, amelyek (vagy amelyek közül kettő) a GM csövek feletti abszorbensben (pl. a tetőszerkezetben) keletkeztek. Az ilyen események megnövelik a kis sűrűségű ködkamrafelvételek számát, tehát a γ spektrumkitevő növekedését okozhatják. A növekedés kvantitatív becslése azonban nem lehetséges, mert ehhez ismerni kellene a KLZ elektronjainak és fotonjainak irány és energia szerinti eloszlását

egyetlen záporon belül s ha ez ismeretes lenne is, akkor is szinte leküzdhetetlen matematikai nehézségekkel járna a számítás végrehajtása. A szerzők nem adják meg a GM cső feletti tető vastagságát, csupán annyit mondanak, hogy a tető nem volt vastag.

b) A [61] mérésben a számlálócsövek közel voltak a ködkamrához (1 m-en belül; a mi mérésünkben 4 m és 9 m között voltak ezek a távolságok) és

c) A [61] mérésben a számlálócsövek felülete kicsi ($18,3 \text{ cm}^2$ volt, a számlálócsövek nem voltak telítésben, míg a mi mérésünkben a számlálócsövek felülete 320 cm^2 volt, s a számlálócsövek telítésben voltak.

A b) és c) eltérések hatásukban nagyjából kompenzálják egymást: azt eredményezik, hogy mindkét mérésben a ködkamrára és közvetlen környezetére (1 m-es körzeten belül) eső záporosűrűség szolgált alapul a záporok kiválasztásánál, továbbá mindkét mérés torzítatlanul a számspektrum kitevőjét adja (ha a záporok oldal-szerkezete független a zápor összérszecskeszámától). A [61] mérésnél ezeket a körülményeket a vezérlő csövek és a ködkamra közti távolság kicsisége okozta, a mi mérésünkben pedig a vezérlő csövek nagy felülete (azaz a vezérlő csövek telítettsége).

4. A [61] mérés mérési tartományaként $\Delta > 1100 \text{ rész m}^{-2}$ -t adtak meg. Ez azonban az n/W (vagyis a nyomok száma osztva a ködkamra érzékeny felületével) alapján számított „névleges” mérési tartomány. A mi mérésünk „névleges” mérési tartománya $800 \lesssim \Delta \lesssim 13000 \text{ rész m}^{-2}$ (l. 2a. táblázat), tehát a két mérés gyakorlatilag ugyanabban a sűrűségi tartományban történt.

A mérési körülmények összehasonlításából tehát a következőket állapíthatjuk meg:

1. Nem mutatható ki egyértelműen, mi okozza azt, hogy a [61] mérés nagyon nagy γ értéket szolgáltat. Lehetséges, hogy szerepet játszik ebben a vezérlő GM csövek közti távolság kicsisége.

2. A [61] mérés vezérlése feleslegesen bonyolult, a kiértékelés csak vitatható elhanyagolásokkal lehetséges.

Valószínű, hogy a [61] mérés kiugró végeredménye jórészt statisztikus fluktuációnak tulajdonítható, s csak kisebb részben tulajdonítható a vezérlő GM csövek közti távolságok kicsiségének vagy a vezérlés egyéb körülményeiben végrehajtott elhanyagolásoknak.

IV. Az elemi kölcsönhatások természete 10^{14} eV felett

1. A nukleon-elektron kaszkád

Ahhoz, hogy mérésünkből a nagyenergiájú ($\gtrsim 10^{14} \text{ eV}$) elemi kölcsönhatások jellemzőire (pl. a hatáskeresztmetszet, inelaszticitás, multiplicitás, a szekunderek jellege, impulzuseloszlása, stb.) kvantitatív következtetéseket vonhassunk le, fel kellene építeni az atmoszférában lejátszódó nukleon-elektron kaszkád (vagyis a KLZ-ok) teljes modelljét.

Kaszkádjelenségek tárgyalásának matematikai modellje a Jánossy-féle „G” egyenletek formájában már régóta adva van [99]. Ezek az egyenletek elvileg alkal-

masak arra, hogy a szóban forgó kaszkád globális tulajdonságaiból a kaszkádban szereplő elemi folyamatok paramétereit kiszámítsuk. Az ismeretlenek száma azonban egyelőre túlságosan sok és a rendelkezésre álló mérések pontossága túlságosan kicsi ahhoz, hogy a feladat ilyen általános formában megoldható lenne. A követendő módszer jelenleg az, hogy a KLZ-ok (azaz az atmoszférában lejátszódó nukleon-elektron kaszkádok) olyan globális jellemzőit keressük ki és mérjük ki, amelyek a) egyértelműen definiálhatók, b) megfelelő pontossággal mérhetők és c) kevés számú elemi kölcsönhatás-típus kevés számú paraméterétől függenek. E követelmények nyilván csak nagyon durván teljesíthetők, ezért az összes eddigi eredmények többé-kevésbé kvalitatív jellegűek.

A régebbi ilyen irányú munkák közül említésre méltók elsősorban *Rozental* [46], valamint *Messel* [47], *Amaldi*, *Mezzetti és Stoppini* [48], *Budini és Molière* [49] dolgozatai. Ezek a munkák azonban többnyire olyan feltevésekből indultak ki, amelyek azóta helytelennek bizonyultak. Az újabb munkák, mint például *Zacepin* [100], *Oda* [50], *Ueda és Ogita* [51], [52], *Olbert* [53] és *Pinkau* [29] dolgozatai a jelenlegi ismeretekkel összhangban levő feltevésekből indulnak ki, de egyik sem lépett még fel a teljesség igényével, vagyis nem tartalmazzák a KLZ-oknak olyan következetesen végigszámolt elméletét, amely a jelenségcsoport minden eddig mért tulajdonságára kiterjedne.

A részleges eredmények sem lebecsülendők: nemcsak azért, mert ezen a területen részleges, sőt kvalitatív információk megszerzése is nagy nehézségekkel jár, hanem azért is, mert megfelelő számú ilyen eredmény esetleg kiindulópontul szolgálhat a G egyenletekre felépítendő iterációs eljáráshoz.

2. Az elemi kölcsönhatások tulajdonságainak energiafüggése

Az I. fejezetben kifejtettük, hogy az utóbbi időben már csak a sűrűség spektrum „hirtelen letörésére” vonatkozó [61, 62, 63] mérések mutattak arra, hogy az elemi kölcsönhatások tulajdonságaiban 10^{16} eV primer energia táján lényeges változás következik be. A III. részben leírt mérés végeredménye azonban azt bizonyítja, hogy a sűrűség spektrum alakja a 10^{17} eV primer energiáig $\pm 0,27$ statisztikus hibával állandó. Figyelemre méltó, hogy kísérletünket ugyanazzal a kísérleti technikával (ködkamra) végeztük, mint a [61] mérést, amely a [61, 62, 63] mérések közül az egyetlen, amely szignifikáns effektust mutatott. Volt ugyanis olyan vélemény [101], amely szerint a [61] mérés szokatlan végeredménye esetleg a ködkamrás technika valamilyen rejtett hibájának tulajdonítható.

A III. fejezetben leírt [21] mérés végeredménye és a mérési körülmények mérlegelése alapján tehát kijelenthetjük, hogy *jelenleg nincsen olyan kísérleti tény, amely az elemi kölcsönhatások tulajdonságainak energiafüggését igazolná*. Ez a [21] mérés legfontosabb eredménye.

3. A kiterjedt légizáporok oldalszerkezetének energiafüggetlensége

A sűrűség spektrum kitevője — mérésünk eredménye szerint — megegyezik a közvetlen számspektrum-mérések eredményével. Ez a tény, mint azt az alábbiakban kimutatjuk, újabb bizonyítéka annak, hogy a kiterjedt légizáporok oldalszerke-

zete független a záport elindító primer rész energiájától. Mivel berendezésünk elsősorban a záportengely közelében fekvő részeket válogatja ki a záporból, az oldalszerkezet energiafüggetlensége is erre a tartományra vonatkozik.

Az óriásberendezésekkel végzett egyedi záporvizsgálatokkal mutatták ki először a záporok oldalszerkezetének energiafüggetlenségét [87, 88]. Ezek a mérések azonban főképp a tengelytől messzebb ($10 \lesssim r \lesssim 100$ m) fekvő tartományokra érzékenyek. Mérésünkben a ködkamra és a záportengely becsapódásának átlagos távolsága, a *Nishimura—Kamata—Greisen* [102] féle oldalszerkezettel számolva $r \approx 8$ m.

a) Az oldalszerkezet energiafüggetlenségének ellenőrzése a számspektrum kitevőjének (γ) és a sűrűségpektrum kitevőjének (γ^*) összehasonlítása alapján (l. [103]).

A II. 3. részben már rámutattunk arra, hogy ha a KLZ-ok oldalszerkezete nem függ a primer energiától és a kísérleti eljárást megfelelően választottuk meg, akkor a nem közvetlen számspektrum-mérések (vagyis a sűrűségpektrum-mérések) eredményeként kapott γ^* kitevő megegyezik γ -val, a számspektrum kitevőjével. Az ott közölt levezetések megfordíthatók: Amennyiben — megfelelő kísérleti eljárással észlelve — azt tapasztaljuk, hogy

$$\gamma^* \neq \gamma,$$

akkor ebből az egyenlőtlenségből egyértelműen következik, hogy a záporok oldalszerkezete függ a primer energiától.

Az oldalszerkezet energiafüggésére valamilyen konkrét függvényt feltételezve az ebben szereplő paraméter értéke γ^* és γ értékéből meghatározható.

Első feladatunk tehát az energiafüggés alakjára valamilyen konkrét feltevést tenni.

Az oldalszerkezet energiafüggetlensége azt jelenti, hogy a $\Delta(r)$ függvényben a záport alkotó részecskék száma (N) csak arányossági tényezőként szerepel (vö. (18) és (18a)):

$$\Delta(r) = Nf(r).$$

Az $f(r)$ függvény menete közvetlen mérések alapján grafikusán elég jól ismeretes, elemi függvényekkel való leírására többféle kifejezőmód is használatos. Megtehetnők azt, hogy megállapodunk valamilyik formularendszer használatában és keressük, hogy az abban szereplő paraméterek értéke nem függ-e a primer energiától (vagy ha tetszik, N -től az összrészecskeszámától). Ezzel azonban önkényesen kitüntetnők $f(r)$ több, egyenértékű írásmódja közül az egyiket; erre nincsen szükség, mert — mint látni fogjuk — az oldalszerkezet energiafüggése $f(r)$ alakjára vonatkozó konkrét feltevés nélkül is vizsgálható.

Tegyük fel tehát, hogy az oldalszerkezet függ a primer energiától, (47) nem igaz. A (47) alaktól való eltérés nem lehet túlságosan erős, mert több kísérletben is azt találták, hogy az energiafüggetlenség jó közelítéssel fennáll. Feltehető ezért, hogy az $f(r)$ függvény alakja lényegében ugyanaz marad különböző primer energiákra is, mindössze affin transzformációt szenved, a primer energia valamilyen hatványának arányában, tehát $f(r)$ helyett $f(rE^\beta)$ a helyes oldalszerkezet. Minthogy a teljes síkra integrált $\Delta(r)$ -nek az energiától függetlenül az összes részecskék számát, N -et kell adni (vö. (2)), azért E -nek az arányossági tényezőben is fel kell lépnie. Legyen tehát [103]

$$\Delta(r, E) = NE^{2\beta} f(rE^\beta)$$

a helyes, energiafüggő oldalszerkezetfüggvény. (18a) segítségével könnyen belátható, hogy az arányossági tényezőt (48)-ban helyesen írtuk fel, vagyis E -től függetlenül valóban

$$\int_0^{\infty} 2\pi r \Delta(r, E) dr \equiv N.$$

Feladatunk most már β értékének meghatározása γ és γ^* értéke alapján.

γ a számspektrum valódi kitevője (I. (3)), amit pl. a záporok egyedi vizsgálata alapján közvetlenül meg lehet határozni (I. II. 1. rész), γ^* pedig a számspektrum kitevőjének statisztikus úton, a (47) feltevéssel meghatározott értéke, a meghatározáshoz a II. 5. részben felsorolt megfelelő módszerek egyikét használva. Vizsgáljuk meg, milyen eredményre vezetnek ezek a módszerek, ha (47) helyett a (48) oldalszerkezettel számolunk. Elegendő egy módszert tárgyalni, a másik kettő tárgyalása teljesen azonos módon végezhető el. Válasszuk például a II. 5. részben felsorolt módszerek közül a telített Geiger—Müller csövekkel vezérelt ködkamra módszerét (II. 5.b. pont). Ezt a módszert alkalmaztuk saját méréseinkben.

Geiger—Müller csövekkel vezérelt ködkamra n nyomot tartalmazó felvételeinek óránkénti száma energiafüggetlen oldalszerkezet vagyis (47) esetén (I. (26) egyenlet)

$$\langle C(n) \rangle = \iiint_{000}^{\infty\infty\infty} G_0^* N^{-\gamma^*-1} \prod_{i=1}^k (1 - e^{-S_i N f_i}) \frac{(W N f_w)^n}{n!} e^{-W N f_w} dN dx_0 dy_0. \quad (49)$$

(A jelölések jelentését I. a (26) egyenletnél). A Geiger—Müller csövek telítettsége azt jelenti, hogy $e^{-S_i N f_i}$ ($i=1, 2, \dots, k$) elhanyagolhatóan kicsi, tehát

$$\langle C(n) \rangle = \iiint_{000}^{\infty\infty\infty} 2\pi r G_0^* N^{-\gamma^*-1} \frac{(W N f(r))^n}{n!} e^{-W N f(r)} dN dr, \quad (50)$$

ahol a koordinátarendszer középpontját a ködkamra középpontjába helyeztük és polárkoordinátákat vezettünk be; r a záportengely becsapódási pontja és a ködkamra távolsága. Az N szerinti integrálás elvégzésével

$$\langle C(n) \rangle = G_0^* \frac{(n - \gamma^* - 1)!}{n!} \int_0^{\infty} (W f(r))^{\gamma^*} 2\pi r dr \quad (51)$$

Energiafüggő oldalszerkezet (vagyis (48)) esetén (50) helyett

$$\langle C(n) \rangle = \iiint_{000}^{\infty\infty\infty} 2\pi r G_0 N^{-\gamma-1} \frac{[W N E^{2\beta} f(r E^{\beta})]^n}{n!} e^{-W N E^{2\beta} f(r E^{\beta})} dN dr \quad (50a)$$

írandó. Az integrálás elvégzéséhez szükségünk van E és N (vagyis a primer energia és az összrészecskeszám) összefüggésére. Ez csak elméleti úton határozható meg,

mert E közvetlenül nem mérhető. Valamennyi elmélet megegyezik abban, hogy E és N összefüggése nem nagyon tér el az egyenes arányosságtól. A legmegbízhatóbbnak Olbert számítása [105] tekinthető, szerinte tengerszinten

$$E = aN^\alpha, \quad (52)$$

ahol

$$a \cong 40,$$

ha E -t GeV-ekben mérjük, és

$$\alpha \cong 0,86.$$

Beírva ezt az (50a) egyenletbe, majd bevezetve az

$$r = a^{-\beta} N^{-\alpha\beta} Q$$

$$dr = a^{-\beta} N^{-\alpha\beta} dQ$$

helyettesítést s ezután N szerint integrálva

$$\langle C(n) \rangle = \frac{2\pi a^{-2\beta} G_0}{1+2\alpha\beta} \frac{\left(n - \frac{\gamma+2\alpha\beta}{1+2\alpha\beta} - 1\right)!}{n!} \int_0^\infty [W_a^{2\beta} f(Q)]^{\frac{\gamma+2\alpha\beta}{1+2\alpha\beta}} Q dQ. \quad (51a)$$

(51) és (51a) összehasonlításával

$$\gamma^* = \frac{\gamma + 2\alpha\beta}{1 + 2\alpha\beta}$$

honnan

$$\beta = -\frac{1}{2\alpha} \frac{\gamma^* - \gamma}{\gamma^* - 1}. \quad (53)$$

Pontosan ugyanazt az eredményt kapjuk akkor is, ha nem hanyagoljuk el (49)-ben az $e^{-S_i N f_i}$ tagokat, hanem csak annyit tételezünk fel, hogy $f_1 \cong f_2 \cong \dots \cong f_k \cong f_w$. Pontosán az (53) összefüggést kapjuk továbbá akkor is, ha a II. 5. részben felsorolt többi módszereket alkalmazzuk meghatározására [103].

Vizsgáljuk meg, hogy pozitív β az oldalszerkezet növekvő primer energia melletti ellaposodását vagy kicsúcsosodását jelenti-e. Ez természetesen függ az $f(r)$ függvény alakjától, tehát $f(r)$ -re most már valamilyen konkrét alakot el kell fogadnunk. Az $f(r)$ felírására használt függvények megegyeznek abban, hogy a záportengelytől néhány méternél nem nagyobb távolságban

$$f(r) \sim r^{s-2}, \quad (54)$$

ahol s az úgynevezett korparaméter (l. pl. [104]), értéke a zápor fejlettségi fokától függ és feltétlenül 0 és 2 közé esik; átlagos értéke tengerszinten 1,2. (48) és (54) összehasonlítása alapján

$$\Delta(r, E) \sim NE^{2\beta} (rE^\beta)^{s-2},$$

vagyis

$$\Delta(r, E) \sim NE^{s\beta} r^{s-2}, \quad (55)$$

ha r nem több néhány méternél. Minthogy s pozitív, azért — (55) szerint — pozitív

β azt jelenti, hogy a tengelytől adott távolságban található záporosűrűség növekvő primer energia mellett erősebben nő, mint az összrészecskeszám, tehát a záporok növekvő primer energia mellett kicsúcsosodnak. Negatív β azt jelenti, hogy a záporok növekvő primer energia mellett ellaposodnak.

b) Kísérleti eredmények az oldalszerkezet energiafüggetlenségére γ és γ^* összehasonlítása alapján.

γ értékét a közvetlen számspektrum-mérésekből vehetjük; ezek ugyanis — megfelelő kiértékelési módszert alkalmazva — függetlenek az oldalszerkezet esetleges energiafüggésétől.

A $10^{16} \text{ eV} < E < 10^{18} \text{ eV}$ közötti primer energiákon végzett közvetlen számspektrum-mérések ([64—68], l. 1.a táblázat) súlyozott átlaga

$$\gamma = 1,87 \pm 0,04.$$

Ugyanebben a primer energiatartományban négy olyan sűrűség spektrum-mérés ismeretes ([61, 69, 55a] és a saját [21] mérés), amelyek körülményei olyanok, hogy torzítatlanul adják vissza a számspektrumot energiafüggetlen oldalszerkezet esetén.

A [61] mérés valószínűleg szisztematikus hibát tartalmaz, az [55a] mérés pedig egymástól igen messze (1000 m-re) fekvő számlálócsősorokkal történt, tehát nem jellemző a záporok tengelyköri részeinek oldalszerkezetére.

A [69] mérés igen közel elhelyezett ($\approx 3,2 \text{ m}$) számlálócsősorokkal történt, 3860 m tengerszintfeletti magasságban. A [69] és [21] mérések szintje közötti 3450 m különbség azonban nem számottevő az oldalszerkezet energiafüggése szempontjából, tehát a két mérés eredményét átlagolhatjuk. A két sűrűség spektrum kitevő átlagára

$$\gamma^* = 1,75 \pm 0,11$$

adódik.

γ és γ^* értékét (53)-ba beírva, $s = 1,2$ és $\alpha = 0,86$ -ra való tekintettel

$$\beta = +0,09 \pm 0,10$$

ill.

$$s\beta = +0,11 \pm 0,12.$$

(A tengelyköri részek oldalszerkezetének energiafüggésére az $s\beta$ mennyiség jellemző, vö. (55), és a tekintetbe vett mérések a zápor tengelyköri részeit válogatták ki). Látható, hogy $s\beta$ nem különbözik szignifikánsan zérustól és kétszeres statisztikus hibának megfelelő biztonsággal

$$-0,13 \lesssim s\beta \lesssim +0,35.$$

A záportengely környezetének oldalszerkezetére vonatkozólag $E \gtrsim 10^{16} \text{ eV}$ tartományban közvetlen vizsgálatok eddig még nem történtek. Az itt ismertetett közvetett eljárás arra az eredményre vezetett, hogy az oldalszerkezet energiafüggőségére utaló jelenség a jelenlegi észlelési adatok alapján a záportengely környezetében nem található.

A [61] dolgozat végeredményével a $\gamma^* = 2,9 \pm 0,3$ értékkel hasonlítva össze a $\gamma = 1,87 \pm 0,04$ számspektrumkitevőt

$$s\beta = -0,38 \pm 0,05$$

adódik, ami az oldalszerkezet erős energiafüggésére (és pedig növekvő energiával a tengely viszonylagos ritkulására) mutatna. A tengely ritkulása, vagyis az oldalszerkezet ellaposodása a magaktív kölcsönhatások szekunderjeinek szögeloszlásában bekövetkező erős változást (az anizotrópia megszűnését) vagy pedig a rugalmatlansági tényező jelentős növekedését jelentené — nagy valószínűséggel mind a kettőt. A már részletezett okoknál fogva azonban a [61] mérés nem bizonyító erejű. Jelenleg nincs tehát olyan kísérleti tény, ami a nagyenergiájú ($10^{14} - 10^{16}$ eV) kölcsönhatások paramétereinek energiafüggésére mutatna.

V. Összefoglalás

1. A sűrűség-spektrum-mérési módszerek részletes analízise útján kikerestük azokat a módszereket, amelyek nem érzékenyek a sűrűségnek a záporon belüli változására és kimutattuk, hogy az ezekkel a módszerekkel mért sűrűség-spektrum-kitevők azonosak a számspektrum kitevőjével, ha a záporok oldalszerkezete független a primer energiától.

2. A sűrűség-gradiensre nem érzékeny, és nagy sűrűségek pontos mérését lehetővé tevő módszerrel, és pedig Geiger—Müller csövekkel vezérelt ködkamra alkalmazásával, meghatároztuk a sűrűség-spektrum kitevőjét (γ^*). A mérési adatokat a legnagyobb valószínűség módszerével dolgoztuk fel; a sűrűségtartomány becslésére is megfelelő matematikai statisztikai módszereket alkalmaztunk. Eredmény: az $500 \lesssim A \lesssim 4000$ részecske/ m^2 tartományban

$$\gamma^* = 1,69 \pm 0,27.$$

Megállapítható, hogy γ^* nem mutat hirtelen erős emelkedést a kisebb sűrűségek mellett észlelt értékekhez képest, szemben a [61, 62, 63] dolgozatok állításaival. [62] és [63] esetében statisztikus fluktuációról van szó; γ^* -nak a [61] dolgozatban észlelt nagy értéke ($\gamma^* = 2,9 \pm 0,3$) azonban nem magyarázható teljes egészében statisztikus fluktuációval.

3. Mérésünk kísérleti körülményei olyanok voltak, hogy az általunk észlelt sűrűség-spektrum kitevője (γ^*) akkor és csak akkor egyezik meg a számspektrum kitevőjével (γ), ha a KLZ-ok tengely-közeli ($r_{\text{atl}} \approx 8$ m) oldalszerkezete független a primer energiától.

a) Ha elfogadjuk azt, hogy a KLZ-ok oldalszerkezete független a primer energiától (erre mutatnak a [87, 88] mérések, azonban ezeket a méréseket meglehetősen nagy $10 \lesssim r \lesssim 100$ m tengelytávolságok mellett végezték), akkor mérésünk azt bizonyítja, hogy a KLZ-ok részecskeszám szerinti eloszlásának (számspektrumának) kitevője az $5 \cdot 10^6 \lesssim N \lesssim 4 \cdot 10^7$ részecskeszám-tartományban

$$\gamma = \gamma^* = 1,69 \pm 0,27,$$

meg egyezésben más eljárásokkal végzett számspektrum-mérésekkel.

b) Ha elfogadjuk γ -nak más szerzők által észlelt értékét ($\gamma = 1,87 \pm 0,04$), akkor γ és γ^* megegyezéséből arra következtethetünk, hogy a KLZ-ok oldalszerkezete a tengely közelében fekvő részekben ($r \approx 8$ m) sem függ a primer energiától. Kidolgoztuk az oldalszerkezet energiafüggésének kvantitatív ellenőrzési módszerét

γ és γ^* összehasonlítás alapján. A $\Delta(r)$ oldalszerkezetfüggvény esetleges energiafüggését

$$\Delta(r, E) = NE^{-\beta} f(rE^{-\beta/2})$$

alakban keresve, megállapítottuk, hogy β nem tér el szignifikánsan zérustól, (vagyis Δ nem függ szignifikánsan E -től); kétszeres statisztikus hibának megfelelő biztonsággal

$$-0,3 \lesssim \frac{s}{2} \beta \lesssim +0,1,$$

ahol s az észlelt KLZ-ok korparamétere. (Δ -nak E -től való függését a tengely közelében az $\frac{s}{2} \beta$ mennyiség jellemzi.)

4. A KLZ-ok tanulmányozása jelenleg az egyetlen út a $\gtrsim 10^{14}$ eV energiájú elemi kölcsönhatások vizsgálatára. A KLZ-okra vonatkozó eddig ismert kísérleti tények között nincs olyan, amely arra mutatna, hogy az elemi kölcsönhatások tulajdonságaiban 10^{14} — 10^{16} eV energián lényeges változások következnenek be.

Köszönetnyilvánítások

A szerző őszinte köszönetét fejezi ki *Jánossy Lajos* akadémikusnak a kiterjedt légizáporok problematikájának megvilágításáért, a kísérletek elvi kérdéseiben adott iránymutatásért, a mérés végrehajtása során adott hasznos tanácsaiért s nem utolsósorban azért az útmutatásért, amelyet a mérési adatok kiértékelésének problémakörében nyújtott. Köszönettel tartozom *Fenyves Ervinnek*, a fizikai tudományok doktorának, munkánk iránt tanúsított állandó érdeklődéséért és számos értékes diszkusszióért.

A ködkamra megtervezése és megépítése *Fenyves Ervin*, *Gémesy Tibor*, *Kántor Károly* és *Zsdánszky Kálmán* kartársak munkája volt. *Gémesy Tibor* tudományos munkatárs irányította a ködkamra üzemeltetésével és a felvételek kiértékelésével kapcsolatos munkákat, ezenkívül tevékeny részt vett a mérési eredmények feldolgozásában is. *Sándor Tamás* tudományos munkatárs a készülék üzemeltetésében, *Válas György* tudományos segédmunkatárs a mérési eredmények feldolgozásában nyújtott értékes segítséget. A gépi számoláshoz a programot *Krammer Gergely* tudományos munkatárs készítette s hajtotta végre. Valamennyiüknek köszönetemet fejezem ki.

Köszönettel tartozom a Kozmikus Sugárzási Laboratórium műszerész gárdájának (*Czapolai Imre*, *Schnierer József*, *Tóth Zoltán*, *Ziegelmann Károly*) az elektronikus berendezések és a ködkamra megépítése és üzemeltetése terén, a *Kurtha Géza* vezetése alatt álló mechanikai műhely dolgozóinak a berendezések mechanikai részeinek elkészítése terén, a *Kenderessy Sándor* vezetése alatt álló GM csögyártó csoport tagjainak a szükséges GM csövek előállítása terén, valamint laboratóriumunk laboráns-gárdájának a fényképfelvételek átvizsgálása terén végzett jó munkájáért.

IRODALOM

- [1a] *P. Auger, R. Maze, T. Grivet-Meyer* Comptes Rendus, Paris 206, 1721, 1938 és 207, 228, 1938.
- [1b] *P. Auger, R. Maze, P. Ehrenfest, A. Freon* J. Phys. Rad. 10, 39, 1939.
- [2a] *Jánossy L.* Szóbeli közlés
- [2b] *W. Kolhörster, J. Matthes, E. Weber* Naturwiss. 26, 576, 1938.
- [3] *P. Auger* Comptes Rendus, Paris 207, 907, 1938.
- [4a] *P. Freier, E. J. Lofgren, E. P. Ney, F. Oppenheimer, H. L. Bradt, B. Peters*, Phys. Rev. 74, 213, 1948.
- [4b] *H. L. Bradt, B. Peters*, Phys. Rev. 74, 507, 1948.
- [5] *C. M. G. Lattes, H. Muirhead, G. P. S. Occhialini, C. F. Powell*, Nature 159, 694, 1947.
- [6a] *J. R. Oppenheimer*, New York Meeting of Amer. Phys. Soc. 1947.
- [6b] *H. W. Levis, J. R. Oppenheimer, S. A. Wouthuysen*, Phys. Rev. 73, 127, 1948.
- [7] *J. Steinberger, W. K. H. Panofsky, J. S. Steller*, Phys. Rev. 78, 802, 1950.
- [8] *E. L. Koller, S. Taylor, T. Huetter*, Il Nuovo Cim. 27, 1405, 1963.
- [9a] *O. I. Dovzsenko, Sz. J. Nikolszkij* DAN 102, 241, 1955.
- [9b] *A. T. Abroszimov, G. T. Zacepin, V. J. Szolovjeva, G. B. Khrisztianszen, P. Sz. Sikin*, Izvesztija A. N. 19, 677, 1955.
- [10] *Jánossy L. M. T. A. III. Oszt. Közl. 1, 3, 1951.*
- [11] *J. Linsley* Phys. Rev. Letters, 10, 146, 1963.
- [12] *D. I. Blohincev, V. S. Barasenkov, B. M. Barbasov*
a) *Uszpehi Fiz. Nauk* 68, 417, 1959;
b) *Fortschritte d. Phys.* 10, 435, 1962.
- [13a] *J. Gierula*, Fortschritte d. Phys. 11, 109, 1963.
- [13b] *V. V. Guszeva, N. A. Dobrotin, N. G. Zelevinszkaja, K. A. Kotelnikov, A. M. Lebegyev, Sz. A. Szlavatinszkij*, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 375, 1962.
- [14] *D. I. Blohincev* *Uszpehi Fiz. Nauk* 62, 381, 1957.
- [15a] *I. E. Tamm*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 32, 178, 1957.
- [15b] *D. I. Blohincev, V. Sz. Barasenkov, V. G. Grisin*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 35, 311, 1958.
- [16] *T. E. Cranshaw, W. Galbraith, N. A. Porter, I. de Beer, M. Hillas*, Il Nuovo Cim. 8, 567, 1958.
- [17a] *Sz. I. Nyikolszkij*, Proc. Oxford Conf. Ext. Air Showers, p. 16, 1956.
- [17b] *Sz. I. Nyikolszkij, Ju. N. Vavilov, V. V. Batov*, Dokladi A. N. 111, 71, 1956.
- [18] *K. Greisen* Annual Reviews of Nuclear Sciences 10, 61, 1960.
- [19] *Sz. I. Nyikolszkij*, *Uszpehi Fiz. Nauk*, 78, 365, 1962.
- [20a] *G. V. Kulikov, G. B. Khrisztianszen*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 35, 441, 1958.
- [20b] *S. Fukui, H. Hasegawa, T. Matano, I. Miura, M. Oda, K. Suga, G. Tanahashi, Y. Tanaka*, Suppl. Progr. Theor., Phys. 16, 1, 1960.
- [20c] *A. Ueda, C. B. A. McCusker*, Nucl. Phys. 26, 35, 1961.
- [20d] *G. T. Zacepin*, Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Jaipur, 1963.
- [21] *T. Gémesy, A. Somogyi, G. Válas*,
a) Proc. Int. Conf. High-Energy Phys. Krakow, 1963.
b) Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Jaipur, 1963, sajtó alatt
c) Il Nuovo Cim,
- [22] *G. Bozóky, E. Fenyves, L. Jánossy*, Nucl. Phys. 33, 236, 1962.
- [23a] *G. Cocconi*, Int. Conf. on High-Energy Phys. at CERN, p. 883, 1962.
- [23b] *K. Winter*, Int. Conf. on the Theor. Aspects of Very High-Energy Phenomena, CERN, 61—22, p. 145, 1961.
- [24a] *N. M. Grigorov és mások*, Izvesztija Szer. Fiz. 1964.
- [24b] *V. A. Szmorodin és mások*, Izvesztija Szer. Fiz. 1964.
- [24c] Mindkét mű idézve a következő preprintből: *Sz. N. Vernov, G. B. Khrisztianszen, A. T. Abroszimov, G. V. Kulikov, V. A. Nehin, V. I. Szolovjeva, B. A. Khrenov, O. V. Vedenejev, V. A. Fomin*, Proc. of the Int. Conf. on High-Energy Phys. Dubna, 1964. Preprint.
- [25a] *S. Lal, R. Raghuvaran, B. V. Sreekantan, A. Subrahmanyam, S. D. Verma*, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 390, 1962.
- [25b] *C. Brooke, M. A. Meyer, A. W. Wolfendale* Proc. Phys. Soc. 83, 871, 1964.
- [26a] *J. H. Atkinson, W. N. Hess, V. Perez-Mendez, R. Wallace* Phys. Rev. 123, 1850, 1961.
- [26b] *A. Ashmore, G. Cocconi, A. N. Diddens, A. M. Wetherell* Phys. Rev. Letters, 5, 576, 1960.
- [27] *A. Barbaro-Galtieri, A. Manfredini, B. Quassiani, C. Castagnoli, A. Gainotti, I. Ortalli*, Nuovo Cim. 21, 469, 1961.

- [28] *D. Perkins* Int. Conf. on Theor. Aspects of Very High-Energy Phenomena CERN 61—22, p. 99, 1961.
- [29] *K. Pinkau*, Fortschritte der Phys. 12, 139, 1964.
- [30a] *M. Akashi, K. Shimizu, Z. Watanabe, K. Ogata, N. Ogita, A. Misaki, I. Mito, S. Oyama, S. Tokunaga, M. Tamura, Y. Fujimoto, S. Hasegawa, J. Nishimura, K. Niu, K. Yokoi*, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 427, 1962.
- [30b] *P. H. Fowler*, Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Jaipur, 1963.
- [31] *A. Bigi, S. Brandt, R. Carrara, W. A. Cooper, A. de Marco, G. R. McLeod, Ch. Peyrou, R. Sosnowski, A. Wroblewski*, Int. Conf. on High-Energy Phys. at CERN, p. 247, 1962.
- [32a] *V. Petržílka*, Proceedings of the 1960 Annual Int. Conf. on High-Energy Phys. p. 82.
- [32b] *G. Bozóki, E. Gombosi, E. Fenyves, A. Frenkel, E. Nagy*, Acta Phys. Hung.
- [33a] *N. P. Bogacsev, Sz. A. Bunjatov, T. Viski, Ju. P. Merekov, V. M. Szviridov, V. A. Jarba*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 38, 432, 1960.
- [33b] *G. B. Zsdanov, P. K. Markov, V. N. Sztretszov, A. I. Tretjakova, Cseng Pu-Jing*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 37, 611, 1960.
- [34a] *B. Edwards, J. Losty, D. H. Perkins, K. Pinkau, J. Reynolds*, Phil. Mag. 3, 237, 1958.
- [34b] *E. Lohrmann, M. W. Teucher, M. Schein*, Phys. Rev. 122, 672, 1961.
- [35] *S. Fukui, H. Hasegawa, T. Matano, I. Miura, M. Oda, N. Ogita, K. Suga, G. Tanahashi, Y. Tanaka*, Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Moscow, Vol. 2. p. 30, 1960.
- [36a] *N. A. Dobrotin*, Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Budapest, p. 24, 1957.
- [36b] *K. Greisen*, Progr. in Cosmic Ray Phys. Ed. J. G. Wilson, Vol. III. p. 50, 1956.
- [37] *O. I. Dovzsenko, G. T. Zacepin, E. A. Murzina, Sz. I. Nyikolszkij, V. I. Jakovlev*, Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Moscow, Vol. 2. p. 134, 1960.
- [38] *T. Kameda, T. Maeda, Y. Toyoda*, Proc. Int. Conf. Cosmic Rays, Moscow, Vol. 21. p. 58, 1960.
- [39] *Y. Pal, B. Peters*, Int. Conf. Cosmic Rays, Jaipur, 1963, Preprint.
- [40] *S. Bennett, J. Delvaille, K. Greisen, F. Kendziorski*, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 196, 1962.
- [41] *P. C. Bhattacharya, T. Gémesy, T. Sándor, A. Somogyi, L. Uray*, Nuovo Cim. 24, 290, 1962.
- [42a] *G. Cocconi*, Phys. Rev. 93, 646 és 95, 1705, 1954.
- [42b] *P. Chaloupka*, Phys. Rev. 96, 1709, 1954.
- [43] *L. Jánossy*, Cosmic Rays, Oxford, 1950, p. 202.
- [44] *Sz. Z. Belenkij*, Lavinnije processzi v kozmiceszkijh lucсах, Gosztechizdat, 1948.
- [45] *J. Nishimura, K. Kamata*,
a) Progr. Teor. Phys. 5, 899, 1950, 6, 628, 1951, 7, 185, 1952.
b) Progr. Teor. Phys. Suppl. No 6, 93, 1958.
- [46] *I. L. Rozental*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 23, 440, 1952.
- [47] *H. Messel*, Progress in Cosmic Ray Phys. Vol. II. Ed. J. G. Wilson Amsterdam, 1954.
- [48] *E. Amaldi, L. Mezzetti, G. Stoppini*, Il Nuovo Cim. 10, 803, 1953.
- [49] *P. Budini, G. Molière* Kosmische Strahlung Ed. W. Heisenberg, Berlin, 1953.
- [50] *M. Oda*, Il Nuovo Cim. 5, 615, 1957.
- [51] *A. Ueda, N. Ogita*, Progr. Teor. Phys. 18, 269, 1957.
- [52] *H. Fukuda, N. Ogita, A. Ueda*, Progr. Teor. Phys. 21, 29, 1959.
- [53] *S. Olbert, R. Stora*, Ann. Phys. New York, 1, 247, 1957.
- [54] *L. K. Eidusz, M. J. Adamovics, J. A. Ivanovszkaja, V. S. Nikolajev, M. Sz. Tuljankina*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 22, 440, 1952.
- [55a] *I. N. Antonov, J. N. Vavilov, G. T. Zacepin, A. A. Kutuzov, I. V. Szkvortsov, G. B. Khrisztianszen*, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 32, 227, 1957.
- [55b] *T. E. Cranshaw, W. Galbraith, N. A. Porter*, Phil. Mag. 2, 804, 801, 900, 1957.
- [55c] *G. Clark, J. Earl, W. Kraushaar, J. Linsley, B. Rossi, F. Scherb*, Nature, 180, 353, 406, 1957.
- [56] *L. Jánossy*, Cosmic Rays, Oxford, 1950. p. 324.
- [57] *K. Greisen*, i. m. [36b], p. 58—59.
- [58] *G. Cocconi, V. C. Torgiorgi*, Phys. Rev. 75, 1058, 1949.
- [59] *A. Zawadzki* Proc. of the Int. Conf. on Cosmic Rays, Budapest 1956, p. 96.
- [60] *K. Greisen*, i. m. [36b], p. 68.
- [61] *R. I. Reid, K. Gopaulsingh, D. E. Page, M. Idnurm, C. B. A. McCusker, J. Malos, D. D. Millar, G. Winterton*,
a) Proc. Phys. Soc. 78, 103, 1961;
b) J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A—III. 234, 1962.
- [62] *I. R. Prescott*, Proc. Phys. Soc. A 69, 870, 1956.
- [63] *R. J. Norman*, Proc. Phys. Soc. A 69, 804, 1956.

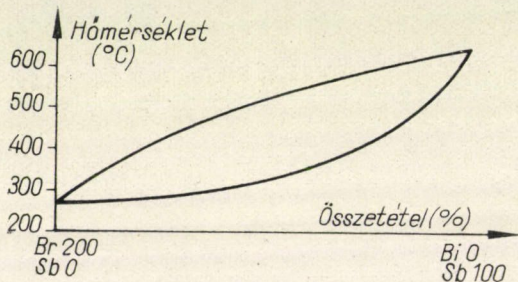
- [64] Sz. N. Vernov, G. B. Khrisztianszen, V. I. Atroskevics, V. A. Dmitriev, Y. U. Fomin, B. A. Khrenov, G. V. Kulikov, Ju. A. Nehin, V. I. Szolovjeva, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 118, 1962.
- [65] A. T. Abroszimov, G. A. Bazilevszkaja, V. I. Szolovjeva, G. B. Khrisztianszen, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 38, 100, 1960.
- [66] G. W. Clark, J. Earl, W. L. Kraushaar, J. Linsley, B. Rossi, F. Scherb, D. W. Scott, Phys. Rev. 122, 637, 1961.
- [67] J. Delvaille, F. Kendzierski, K. Greisen, J. Phys. Soc. Japan 17, Suppl. A3, 76, 1962.
- [68] J. Miura, H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 84, 1962.
- [69] V. P. Zaharova, L. H. Eidusz, Dokl. Akad. Nauk 65, 477, 1949.
- [70] A. Coxell, P. S. Scull, A. W. Wolfendale, Proc. Phys. Soc. 81, 604, 1963.
- [71] H. R. Allan, R. F. W. Beamish, W. M. Glencross, D. M. Thomson, R. D. Wills, Proc. Phys. Soc. 79, 1170, 1962.
- [72] A. E. Csudakov, N. M. Neszterova, V. I. Zacepin, E. I. Tukis, Proc. of the Int. Conf. on Cosmic Rays, Moscow, 1959, Vol. II. p. 50.
- [73] M. H. Brennan, I. A. Lekane, J. Malos, D. D. Millar, C. S. Wallace, M. M. Winn, Il Nuovo Cim. Suppl. 8, 623, 1958.
- [74] J. R. Green, J. R. Barcus, Il Nuovo Cim. 21, 361, 1961.
- [75] R. A. Antonov, Ju. A. Szmorodin, Z. I. Tulinova, Proc. of the Int. Conf. on Cosmic Rays, Moscow, 1959, Vol. II. p. 96.
- [76] I. Dohán, T. Gémesy, T. Sándor, A. Somogyi, Acta Phys. Hung. 9, 97, 1958.
- [77] T. Gémesy, T. Sándor, A. Somogyi, Il Nuovo Cim. 16, 412, 1960.
- [78] G. T. Zacepin, W. W. Miller, I. L. Rozental, L. H. Eidusz, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 17, 1125, 1947.
- [79] A. L. Hodson, Proc. Phys. Soc. 66, 49, 1953.
- [80] L. Jánossy, T. Sándor, A. Somogyi, Acta Phys. Hung. 6, 455, 1957.
- [81] G. Tanahaski, Proc. of the Fifth Interamerican Seminar on Cosmic Rays, La Paz, 1962, 42—2.
- [82] G. V. Kulikov, G. B. Khrisztianszen, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 35, 635, 1958.
- [83] K. Sitte, I. L. Kofsky, D. L. Stierwalt, S. Lehrer, K. Tausk, A. Wataghin, Il Nuovo Cim. Suppl. 8, 684, 1958.
- [84] D. Broadbent, L. Jánossy, Proc. Roy. Soc. A 192, 364, 1948.
- [85] Somogyi A., KFKI Közleményei, 10, 251, 1962.
- [86] L. Jánossy, Theory and Practice of the Evaluation of Measurements Oxford, at the clarendon Press, 1964.
- [87a] O. I. Dovzsenko, Sz. I. Nyikolszkij, Dokladi Ak. Nauk, 102, 241, 1955.
- [87b] Sz. I. Nyikolszkij, V. M. Szeleznev, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 32, 1250, 1957.
- [88] J. Linsley, L. Scarsi, B. Rossi, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 91, 1962.
- [89] B. V. Sreekantan, Extensive Air Shower Studies of the TIFR (Bombay) Group (preprint).
- [90] Somogyi A., KFKI Közleményei.
- [91] A. Somogyi, L. Uray, Il Nuovo Cim. Suppl. 26, 358, 1962.
- [92] Kántor K., Zadánszky K., Magyar Fiz. Folyóirat, 6, 191, 1958.
- [93] Somogyi A., KFKI Közleményei, 2, 38, 1954.
- [94] Zsdánszky K., KFKI Közleményei, 3, 22 és 32, 1955.
- [95] Gémesy T. Kántor K., Magyar Fiz. Folyóirat, 7, 139, 1959.
- [96] P. M. S. Blackett, Proc. Roy. Soc. A 146, 281, 1934.
- [97] L. Jánossy, Theory and Practice of the Evaluation of Measurements, (Oxford, at the Clarendon Press, 1964. §. 324.)
- [98] C. B. A. McCusker, Extensive Air Shower Studies in Australia preprint, 1963.
- [99] L. Jánossy,
 - a) Acta Phys. Hung. 2, 289, 1952;
 - b) Magyar Fiz. Folyóirat, 1, 113, 1953 és 2, 33, 1954.
- [100a] G. T. Zacepin, Proc. of the Oxford Conf. on Extensive Air Showers Harwell, 1956, p. 8.
- [100b] V. V. Guzsavin, G. T. Zacepin, Zsurn. Exp. Teor. Fiz. 32, 365, 1957.
- [101] G. T. Zacepin, J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. A3, 236, 1962.
- [102] K. Greisen, i. m. 36b, p. 26.
- [103] A. Somogyi, On the Relation Between the Density and Number Spectra of EAS.
- [104] K. Greisen, i. m. 36b, p. 24.
- [105] S. Olbert, Idézzé W. Galbraith, Extensive Air Showers, London 1958, p. 117.

A BIZMUT-ANTIMON RENDSZERRŐL*

KERTÉSZ LÁSZLÓ és TÓTH GÁBOR
ELTE Kísérleti Fizikai Tanszék

A bizmut-antimon rendszer állapotábráját, az idevonatkozó cikkek tanulmányozása alapján [1—12] Hansen 1935-ben összegezte [13]. Arra a következtetésre jutott, hogy a Bi—Sb rendszer a korlátlan oldódású ötvözetek típusához tartozik. (1. ábra)

Később C. A. Zapffe, kísérleteinek eredményeképpen azt állapította meg [14], hogy a Bi—Sb rendszerben a Bi—Sb összetétel környezetében eutektikummal rendelkező ötvözet alakul ki. A keletkezett eutektikum 91 órán át tartó hőkezelés után homogénizálódott. Geguzin és Pinesz [15] ugyanezt a vizsgálatot kalometrikus mérésekkel, és a keletkező szilárd fázisú ötvözet energetikai viszonyainak tanulmányozásával végezte el. Az elméleti számítások megegyeztek a kísérletekkel meghatározott korlátlan oldódásra vonatkozó számításokkal. A végzett számítások természetesen termodinamikailag egyensúlyban levő rendszerre vonatkoztak.



1. ábra

Az elmondottak alapján elvileg is érdekes kérdésként merül fel, hogy lehetséges-e ugyanazon két komponens esetében, a hűtési sebességtől függően két, alapvetően különböző típusú állapotábra keletkezése. Alábbi dolgozatunkban ezen kérdés szem előtt tartásával kísérleti módszerekkel végeztük vizsgálatainkat.

Mérési módszerek és berendezés ismertetése

Az állapotábra tanulmányozását differenciál-termoanalízis, és röntgen porfelvételek segítségével végeztük. A differenciál termoanalízishez szükséges berendezés:

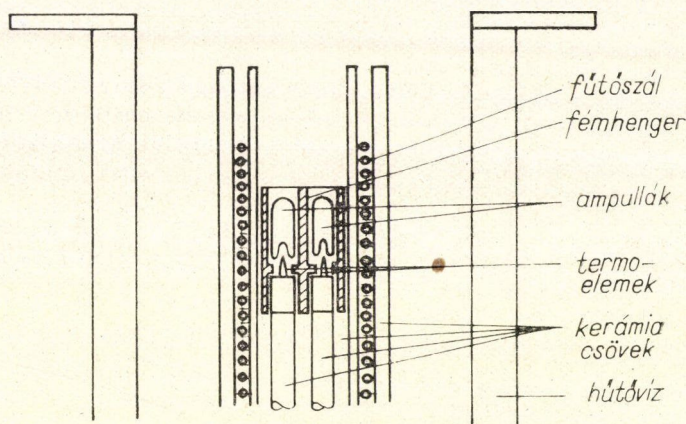
- a) vákuumozható kemencéből,
- b) automatikus hőmérséklet regisztrálóból,
- c) és egy vákuumszivattyú rendszerből áll.

A kemence fűtésére nikrom huzal szolgál. A fűtőtestet kettős fémmal veszi körül. A két réteg között állandó hőmérsékletű víz cirkulál. A vízűtés egyrészt

* Érkezett: 1966. jan. 10,

a fal túlmelegedését gátolja, másrészt a belső melegtér hőmérsékletét függetleníti a laboratóriumban esetlegesen fellépő hőmérséklet ingadozásoktól.

A melegtérben két kerámiacső egy fémhengert tart, melynek furataiba a vizsgálandó és az etalon anyagot tartalmazó ampullák helyezhetők (2. ábra). A fémhenger tartórúdjai egyúttal a termoelemek bevezetését is biztosítják. A termoelemek közvetlenül az ampullákkal érintkeznek.



A kemence belső elrendezése

2. ábra

A hőmérsékletet mérő termoelemek áramát közös fémházban levő két tükrös galvanométer jelzi. Közülük egyik a két anyagban fellépő hőmérsékletkülönbséget, míg a másik, az adott méréshez szükséges hőmérsékleti intervallumban, közvetlenül a vizsgálandó anyag hőmérsékletét méri. A galvanométerekről visszavert fénysugarak útját egy síktükör-rendszer hosszabbítja meg. Ezzel a megoldással a galvanométerek viszonylag kis kitérései is jól regisztrálhatók, ugyanakkor a fém-szekrény méretei jelentősen csökkenthetők. A tükrörendszerből kilépő fénysugarak részben egy sötétvörös üvegskálára, részben egy forgódobra felerősített fényérzékeny papírra esnek. A forgódob forgási sebessége fogaskerék áttételek segítségével változtatható.

A vákuumrendszer rotációs és higany diffúziós szivattyúból áll. A vákuumrendszer a vákuum előállításán kívül lehetővé teszi, hogy a leszívott kemencét tetszés szerinti nyomású semleges gázzal töltsük meg. A nyomást Pirani manométer méri.

A vizsgálandó bizmut-antimon ötvözeteket a fém párolgásának megakadályozása céljából vákuumban, zárt kvarc ampullákban készítettük el. A kvarc ampullák alján egy-egy kis kúp alakú bemélyedés van, a termoelemek számára. A berendezéssel hűlési görbéket vettünk fel kikapcsolt fűtőáram mellett.

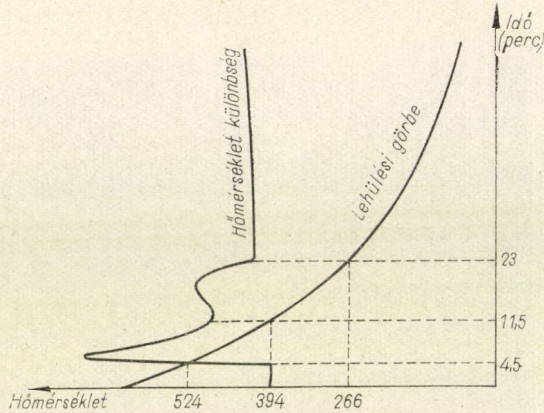
Mérési eredmények ismertetése

A felvett lehülési görbék között legérdekesebbnek az 53% antimont tartalmazó ötvözet mutatkozott.* (3. ábra)

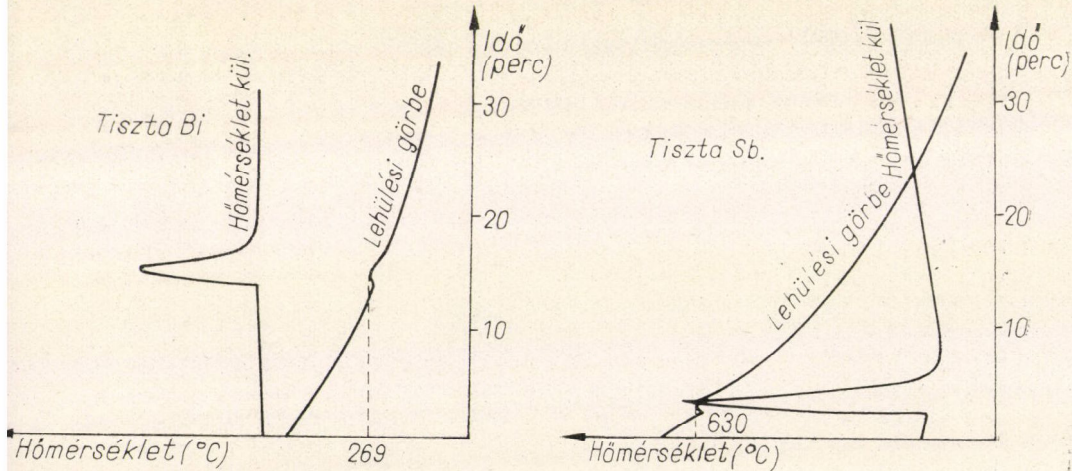
A hőmérséklet különbség görbén a kristályosodás intervallumában két jól megkülönböztethető kitérés található. A kísérletet több ízben megismételve mindannyiszor a 3. ábrán látható görbét kaptuk.

Az ábrán látható „hőmérséklet különbség” görbe a két ampulla közötti hőmérséklet különbséget mutatja, amely — a dolog természetéből adódóan — pár tized $^{\circ}\text{C}$. Ezért a hőmérséklet skála csak a vizsgált anyag hőmérsékletét jelző lehülési görbére vonatkozik.

Két, egymásban korlátlanul oldódó fémből álló rendszer esetében bármely összetételnél egy szilárd fázis alakul ki. A kristályosodás folyamán kezdetben növekvő, majd egy maximum elérése után folyamatosan csökkenő hőmennyiség szabadul fel. A gyakorlatban azonban valamely kis túlhűlés mindig felléphet. Ennek következtében a kristályosodás kezdetén



3. ábra

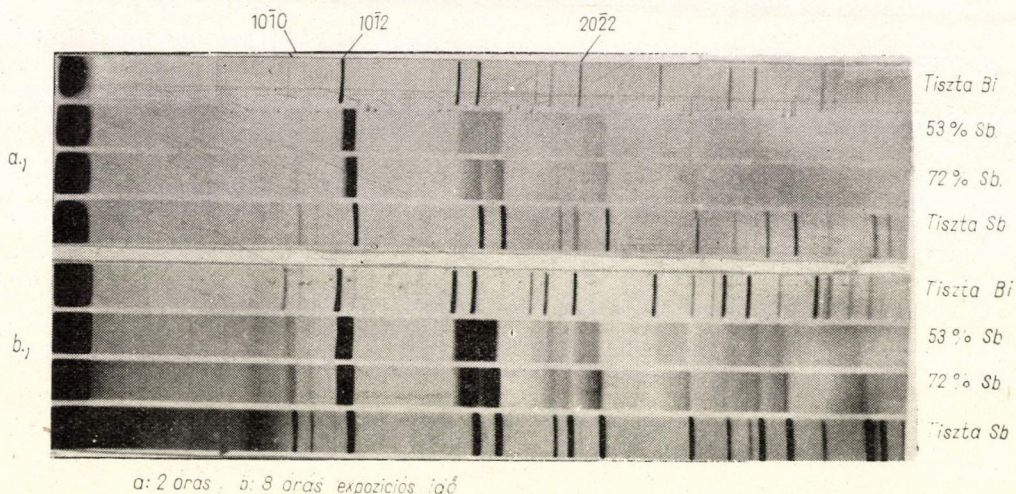


4. ábra

* Az összetétel atomszázalékban értendő, a későbbiekben is.

viszonylag nagyobb mennyiségű hő szabadul fel. A hőmennyiség leadását regisztráló hőmérsékleti görbének, a túlhűtés körülményét is figyelembe véve, egy kezdeti nagyobb kitérés után fokozatosan az egyensúlyi állapotba kellene visszatérni. A 4. ábrán az egy szilárd fázis kialakulására jellemző lehűlési diagramm látható. Jól megfigyelhető a túlhűlés is. (Tiszta Bi ill. tiszt. Sb lehűlési diagrammja.)

A jelen esetben tehát a lehűlési görbe eltér a korlátlan oldódásra jellemző esettől. Az első éles kísértés $534 \pm 3^\circ\text{C}$ -nál van, míg a második kb. 394°C -tól, $266 \pm 3^\circ\text{C}$ -ig adódik.



5. ábra

A termoanalízis befejeztével, az ötvözetek egy részéről Guinier-kamrában röntgen porfelvételek készültek. A rendelkezésre álló röntgenkamra lehetővé tette egyszerre négy felvétel készítését. Az 5. ábrán látható a kapott röntgenfelvételek egyike. A felső sávon a tiszta bizmut, az alsón a tiszta antimon, míg felülről a második sávon az 53% antimont a harmadik sávon pedig a 72% antimont tartalmazó ötvözet felvétele látható. Ez utóbbira a későbbiek során még visszatérünk.

Az 53% antimont tartalmazó felvételen rögtön megállapítható, hogy két egymással izomorf szerkezet van jelen. Az egyik szerkezet rácsparamétere a bizmuthoz, a másiké az antimonhoz van közelebb. Első közelítésben az egyik rács paramétereinek értéke $a = 4,43 \pm 0,01 \text{ \AA}$, $c = 11,62 \pm 0,01 \text{ \AA}$, míg a másiké $a = 4,31 \pm 0,01 \text{ \AA}$, $c = 11,28 \pm 0,01 \text{ \AA}$. (A tiszta bizmuté $a = 4,5367$, $c = 11,8383 \text{ \AA}$, a tiszta antimoné $a = 4,2995$, $c = 11,2516 \text{ \AA}$). A rácsparaméterek számítása azért közelítés, mert a reflexió irányának a vonalprofil maximumát vettük.

A röntgenfelvételekből az eddig ismertettek alapján megállapítható, hogy a jelen hűtési sebesség mellett egyrészt bizmutban oldott antimon, másrészt antimonban oldott bizmut keletkezett.

Az ötvözetről kapott röntgenfelvétel vonalai a tiszta bizmut és antimon megfelelő reflexióihoz képest megkettőződnek és kiszélesednek. A szélesedés jól látható, ha az ötvözet felvételét összehasonlítjuk a tiszta bizmut és antimon felvételével.

vel. Az instrumentális vonalszélességnek a tiszta bizmut és antimon megfelelő vonalszélességét fogadtuk el.

Mint ismeretes, a vonalszélesedést vagy szubmikroszkópikus kristályok jelenléte, vagy az egyes elemi cellák paraméter értékeinek eltérése okozhatja. A rácsparaméter értékek eltérését egy adott ötvözetben belül általában belső feszültségek váltják ki. Kimutatható, hogy a szubmikroszkópikus kristályok okozta vonalszélesedés $\sec \theta$ -val, hol θ a röntgendiffrakció Bragg szöge, míg a belső feszültségek következtében létrejövő deformációk okozta vonalszélesedés $\tg \theta$ -val arányos [16, 17]. Abban az esetben, ha egyidőben mindkét ok fennáll, ezek szétválasztása az ismertetett módszerrel nem mindig sikerül. Pontosabb számítások a vonalprofil Fourier-analízisével végezhetők el [18, 19].

Az 5. ábrán közvetlenül látható, hogy az 53% Sb összetételnél a vonalak erősen kiszélesednek. Az elvégzett számítások azt mutatják, hogy a vonalszélesedés $\tg \theta$ -val arányosan növekszik. A vonalszélesedés mérésénél az ötvözet 10 $\bar{1}0$, 10 $\bar{1}2$ és 20 $\bar{2}2$ indexű kettős vonalainak baloldalát a tiszta bizmut, jobboldalát pedig a tiszta antimon megfelelő vonalaival hasonlítottuk össze.

I. TÁBLÁZAT

	Hőkezeletlen		Hőkezelt	
	20 $\bar{2}2$	10 $\bar{1}0$	20 $\bar{2}2$	10 $\bar{1}2$
Összehasonlított vonalak indexe				
Vonalszélesedés arány	bal: 2,7	jobb: 1,3	bal: 2,5	jobb: 1,9
$\tg \theta$ -val számolt arány	bal: 2,3	jobb: 2,4	bal: 1,9	jobb: 1,9
$\sec \theta$ -val számolt arány		1,1		1,1

A vonalszélesedés jelen esetben nem magyarázható kizárólag belső feszültségek jelenlétével. A $\tg \theta$ -val arányos vonalszélesedés mindössze a rácsparaméterek változását jelzi. Esetünkben, pedig a rácsparaméterek változása a kristályosodás folyamán bekövetkező koncentrációváltozás eredménye is lehet.

Ennek alapján feltételezhető, hogy a két maximum környezetében a változó összetétel következtében adódik a rácsparaméter változása is.



6. ábra

Ezen ötvözetet 10 órán át, közvetlenül a szolidusz alatt (25 $^{\circ}$ C-on) hőkezeltük. A próbatest röntgenfelvétele a 6. ábrán látható. A reflexiók szélessége valamelyest csökkent, de a két különböző maximum érték még élesebben megkülönböztethető. Ebből arra következtethetünk, hogy a hőkezelés alatt a porítással okozott feszültségek eltűntek, de a koncentrációváltozás miatt fennálló vonalszélesedés megmaradt.

Következtetések

Az elvégzett kísérletek eutektikum létezését cáfolják. Eutektikum keletkezése esetén a termoanalízis görbájén a második kitérésnek éles maximumot kellene adni. A kísérletben pedig a második kitérésre jellemző kristályosodás hosszabb ideig tart, mint az első.

A röntgenvizsgálatok az ötvözetben két izomorf szerkezet létezését mutatják ki. Másrészt a reflexiós vonalszélesedés a kristályosodás folyamán történő koncentráció-változásra utal.

Az eddig elvégzett kísérletek alapján tehát megállapítható, hogy az adott hűtési sebesség mellett a likvidusz és szolidusz között bizmutban oldott antimon ill. antimonban oldott bizmut keletkezik különböző hőmérsékleteken.

IRODALOM

- [1] C. T. Heycock, F. H. Neville Journ. chem. Soc. 61, 896, 1892.
- [2] C. R. A. Wright Journ. Soc. chem. Ind. 13, 1014, 1894.
- [3] H. Gautier (et Rolland-Gosselin), Bull. Soc. Encour. Ind. nat., 1, 1314, 1896.
- [4] G. Charpy, Bull. Soc. Encour. Ind. nat., 2, 384, 1897.
- [5] K. Hütter, G. Tamman, Zeitschr. Anorg. Allg. Chemie, 44, 131/44, 1905.
- [6] A. Szapozsnyikov, Zsurnal Russzk. fiziko-kimicsecskovo obscsesztva, 40, 665, 1908.
- [7] N. Parravano, E. Viviani, Atti R. Accad. Lencei Roma, 5, 19, 835, 1910.
- [8] M. Cook, Journ. Inst. Metals, 28, 421, 1922.
- [9] B. Otani, Sci. Rep. Tohoku Univ. 13, 293, 1924.
- [10] E. G. Bowen, W. Morris-Jones, Philos. Mag. 7, 13, 1029, 1932.
- [11] N. A. Puskin, Zsurnal Russzk. fiziko-kimicsesztkovo obscsesztva, 39, 328, 1907.
- [12] W. F. Ehret, M. B. Abramson, Journ. Amer. Chem. Soc. 56, 385, 1934.
- [13] M. Hansen, K. Anderko: Constitution of Binary Alloys Mac-Graw Hill New-York 1958. 332. old.
- [14] C. A. Zapffe, Zeitschr. f. Metallkunde, 44, 397, 1953.
- [15] B. Ja. Pinyesz: Ocserki po metallofizike, Harkovszkovo Gaszudarscsesztvo Unyiverszityeta, 1961. 57—59. old.
- [16] J. Sz. Umanszkij: Röntgenografia metallov. Gosz. Naucs. Tech. Izd. Moszkva 1960. 268—293.
- [17] Sz. Gorelik, L. N. Rasztorjujev, P. A. Szkákov: Röntgenograficseskij i elektronograficseskij analiz. metallov. Naucs. Tech. Izd. Moszkva 1963. 122—130.
- [18] B. Ja. Pinyesz: Osztrofokusnie röntgenovsznie trubki a prikladnoj rönt. Analiz. Gosz. Tech. Izd. Moszkva 1955.
- [19] A. Guinier: Theorie et Technique de la Radiocristallographie Dunod. Paris 1956.

OLDATBÓL VALÓ KRISTÁLYOSODÁSKOR FELLÉPŐ NÖVEKEDÉSI SEBESSÉGINGADOZÁSOK VIZSGÁLATA*

MALICSKÓ LÁSZLÓ

ÉKMŰE. Kísérleti Fizikai Intézet, Budapest

Konstans külső feltételek mellett oldatcseppekben növekedő KBr kristályok növekedési sebességében fellépő ingadozásokat vizsgáltuk. Mérési eredményeinket az oldatban képződő asszociátumok modellje, valamint előzetes elméletek segítségével magyaráztuk. Reméljük, hogy modellünk alapján a kristálymag képződéssel kapcsolatos újabb eredmények [15], valamint a kristályosodáskor keletkező kristályhibák kérdését is tisztázhatjuk. Mindkét irányban további vizsgálatok folynak.

Korábbi munkákból ismeretes az a tény, hogy konstans külső feltételek mellett végbemenő kristályosodáskor a kristályok egyes határfelületeinek növekedési sebessége időben ingadozásokat mutat. Ez az ún. „fluktuáló” növekedés mikroszkóppal közvetlenül megfigyelhető [1]. Az elmélet szerint kristályok növekedésénél leggyakrabban szerepet játszó egyensúlyi ill. legsűrűbb pakolású felületek növekedése kétdimenziós felületi magokból vagy csavardiszlokációk körül kialakuló *atomáris felületi rétegeken* keresztül valósul meg [2]. A kísérletek szerint az említett felületek növekedése gyakorlatilag többatomos vastagságú *növekedési rétegekben* történik [3]. A kristályfelületek növekedési sebességében mutatkozó ingadozások valószínűleg az ilyen többatomos növekedési rétegek képződésében és felületmenti terjedésében fellépő ingadozásokra vezethetők vissza [4, 5, 6, 7].

Oldatban nőtt tű- és lemezszerű KBr-kristályoknál észlelt sebesség ingadozásokról néhány előzetes munkában már említést tettünk, a kérdés részletesebb tárgyalása nélkül [8, 9, 10, 11]. Jelen munkában az említett sebesség ingadozások részletesebb tárgyalását tűztük ki célul.

Kísérletek

A vizsgálatokat túltelített oldatcseppekben növekedő KBr kristályokon végeztük, szobahőmérsékleten. A tárgylemezre helyezett kissé telítetlen oldatcsepp lassú párolgás közben túltelítődött, miközben kristályok keletkeztek. A túltelítettséget párolgási sebesség mérések segítségével becsültük, közvetlenül nem mértük. A becsült maximális relatív túltelítettség $\sigma_{\max} \approx 0,3-0,4$. Egy-egy kristályka megfigyelt növekedési folyamata maximum néhány percig tartott, ezalatt a tárgylemez és az oldatcsepp hőmérsékletét kb. konstansnak tekinthettük; a lehetséges hőmérsékletingadozás kisebb volt, mint $\pm 0,5^\circ\text{C}$.

A cseppekben keletkezett kristályok közül főleg a tűkristályok és a vékony lemezszerű kristálykák növekedési folyamatának vizsgálatára fordítottunk figyel-

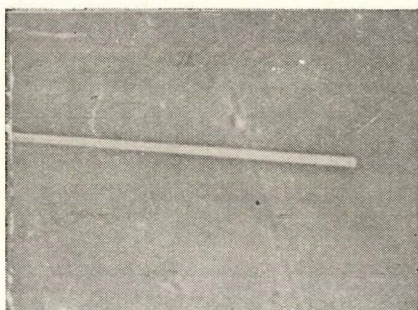
* Érkezett: 1966. jan. 26.

met. Mindkét fajta kristályt (100) lapok határolták. A növekedési folyamatot fénymikroszkóppal figyeltük és mikrofilmen rögzítettük. A kristályok növekedési sebességét a mikrofilm segítségével mértük. A különböző cseppekben a külső feltételeket (cseppméret, párolgási sebesség, hőmérséklet) a továbbiakban azonosnak tekintjük, miután a kísérletek szerint az esetleges kis eltérések lényeges befolyást nem mutattak az eredményekre.

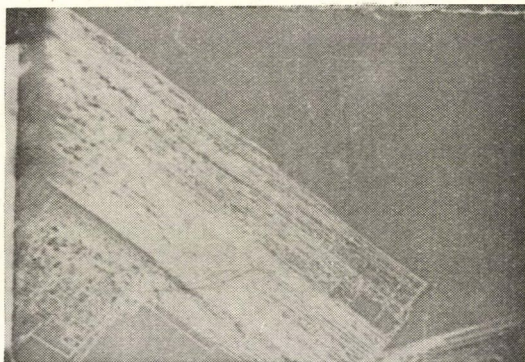
Eredmények

A mikrofilmekből két jellegzetes képet közlünk. Az 1. ábrán egy tűkristály látható; a bejelölt nyíl a tű axiális növekedési irányát mutatja. A 2. ábrán egy lemezszerű kristály látható; a két nyíl az oldallap normális irányú növekedését ill. a sokatomos növekedési réteg tangenciális terjedési irányát mutatja.

Jelöljük: a tűkristály momentán axiális növekedési sebességét $v_{w,i}$ -vel, a lemezszerű kristályok normális irányú momentán sebességét $v_{n,i}$ -vel, a növekedési rétegek momentán tangenciális terjedési sebességét $v_{s,i}$ -vel, (röviden: $v_{j,i}$ ahol $j = w, n, s; i$ futóindex).



1. ábra. Oldatban növekedő KBr tűkristály (250×)



2. ábra. Lemezalakú KBr kristály növekedési rétegekkel (160×)

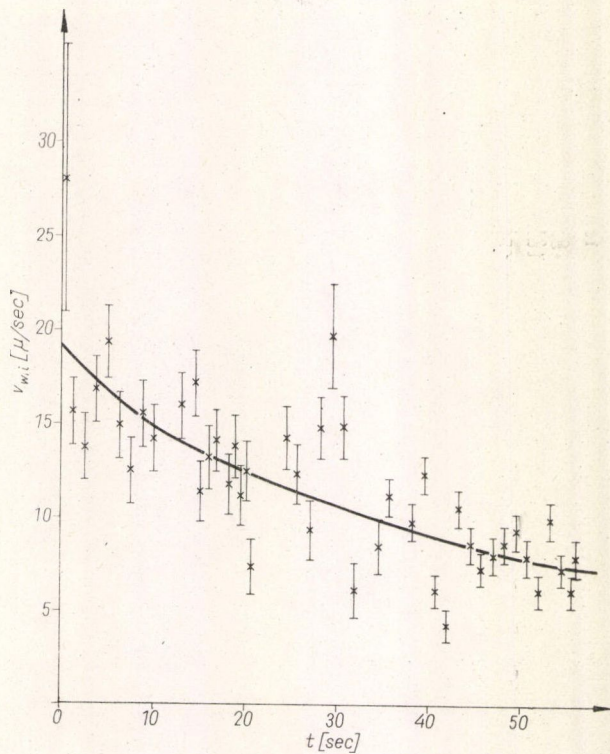
A 3., 4. és 5. ábrákon egy-egy jellegzetes példát mutatunk be arra vonatkozóan, hogyan változnak időben $v_{w,i}$, $v_{n,i}$, $v_{s,i}$ pillanatnyi sebességértékek a növekedés folyamán. Jól látható, hogy a mérési pontok a számolt maximális mérési hibáknál nagyobb szórást mutatnak. A mérési eredmények egy sematikus képbe foglalhatók össze (6. ábra), amelyben még a következő mennyiségek lépnek fel:

$$\text{átlagos sebesség} \quad \bar{v}_{j,i} = \frac{v_{j,i-2} + v_{j,i-1} + v_{j,i+1} + v_{j,i+2}}{4},$$

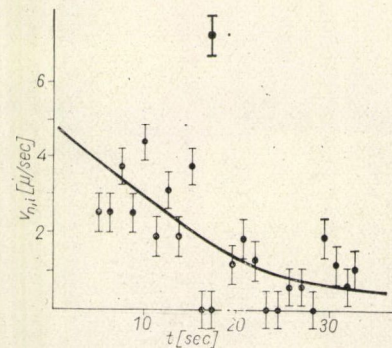
$$\text{növekedési sebesség ingadozás} \quad \Delta v_{j,i} = v_{j,i} - \bar{v}_{j,i},$$

$$\text{két szomszédos ingadozás közt eltelt idő} \quad \Delta t_{j,i},$$

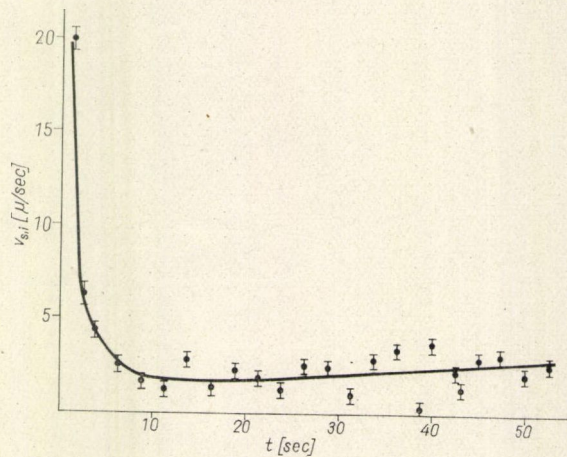
$$\text{sebesség-ingadozás lefutási ideje} \quad \Delta \tau_{j,i}.$$



3. ábra. A pillanatnyi axiális növekedési sebesség ($V_{w,i}$) időbeli változása tükristálnál

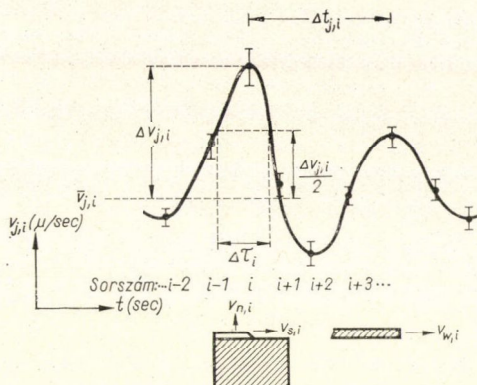


4. ábra. A pillanatnyi normális irányú növekedési sebesség ($V_{n,i}$) időfüggése lemez alakú kristálnál

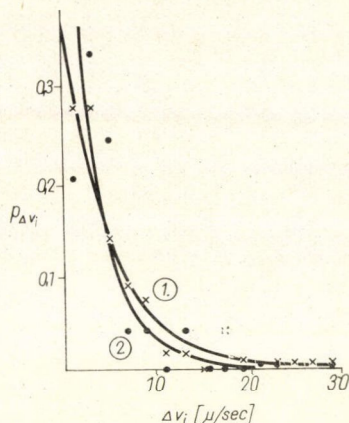


5. ábra. Sokatemos növekedési réteg terjedési sebességének ($V_{s,i}$) időfüggése

A fentiekén kívül vezessük még be a következő jelöléseket: egy ingadozás térbeli kiterjedése („átmérője”) $\Delta l_{j,i} = \frac{\Delta v_{j,i}}{2} \cdot \Delta \tau_{j,i}$, két szomszédos ingadozás térbeli helye közti átlagos távolság $d_j = v_j \Delta t_j$, ahol v_j ill. Δt_j a $v_{j,i}$ ill. $\Delta t_{j,i}$ értékeknek az összes mérési adatokra vonatkozó átlagértéke.



6. ábra. Sebesség-ingadozások sematikus képe



7. ábra. Ingadozások eloszlási görbéje ($P_{\Delta v}$)

- ① növekedési rétegek,
- ② tűkristályok esetére

A továbbiakban az ingadozásokra jellemző fent említett mennyiségeket két — szempontunkból — fő részre szétválasztva tárgyaljuk. Éspedig: 1) a tűkristályokra, melyek növekedésük folyamán mindig a tűkristály méreteihez képest nagy „szabad” oldattérfogatokban nőnek, 2) lemezszerű kristályok növekedési rétegeire, melyek mindig a kristályfelület közvetlen közelében fekvő oldattérfogatokban terjednek.

Az említett kísérleti feltételek mellett mért $\Delta v_{j,i}$ sebesség-ingadozások ill. a belőlük számított $\Delta l_{j,i}$ értékek előfordulási gyakoriságát ($P_{\Delta v}$ ill. $P_{\Delta l}$) a 7. és 8. ábrán mutatjuk be, ahol az ① görbék a növekedési rétegekre, ② görbék a tűkristályokra vonatkoznak. Látható, hogy $\Delta v_{j,i}$ ill. $\Delta l_{j,i}$ növekedésével előfordulásuk gyakorisága csökken. Másrészt a tűkristályoknál a kisebb $\Delta v_{j,i}$, $\Delta l_{j,i}$ értékek gyakoribbak (kb. $\Delta v_{j,i} < 5 \mu/\text{sec}$). Az eloszlások mindkét fajtája ($\Delta v_{j,i}$ ill. $\Delta l_{j,i}$ szerint) mindkét fő esetre (tű, réteg) egy-egy exponenciális függvényvel közelíthető.

$$P_{\Delta} = P_0 \exp \{-\alpha \Delta\}, \quad (1)$$

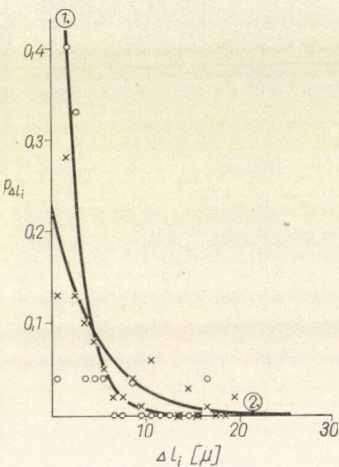
ahol Δ szimbolizálja $\Delta v_{j,i}$ ill. $\Delta l_{j,i}$ mennyiségeket, a P_0 és α konstansokat pedig az I. táblázat tartalmazza.

A $P_{\Delta v}$ görbénél (7. ábra) $\Delta v_{j,i} < (1-2) \mu/\text{sec}$ tartományban a gyakoriság lecsökkenése annak következménye, hogy a mérési hibával egyező ill. annál kisebb ingadozásokat nem vettük figyelembe.

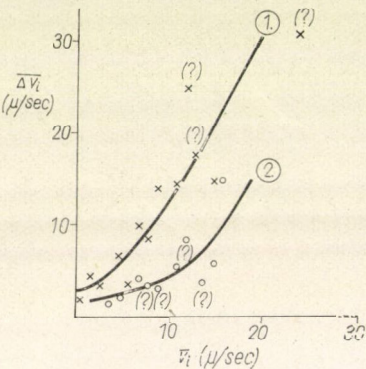
I. TÁBLÁZAT

		P ₀	α	
Növekedési rétegekre	(Δv)	0,37	0,19	sec·μ ⁻¹
	(Δl)	0,22	0,21	μ ⁻¹
Tűkristályokra	(Δv)	0,60	0,29	sec·μ ⁻¹
	(Δl)	0,81	0,51	μ ⁻¹

A $\bar{v}_{j,i}$ és $\overline{\Delta v}_{j,i}$ közti összefüggést a 9. ábrán láthatjuk. Az átlagsebesség növekedésével mind növekedési rétegeknél (① görbe), mind tűkristályoknál (② görbe) nő az átlagos ingadozás.



8. ábra. Az ingadozások térbeli kiterjedésének eloszlási görbéje ($P_{\Delta l_i}$)
① növekedési rétegek,
② tűkristályok esetére



9. ábra. Az ingadozások ($\overline{\Delta v}$) növekedési sebességtől (\bar{v}) való függése.
① növekedési rétegek,
② tűkristályok esetére

A II. táblázatban összefoglaltunk még néhány olyan további mérési adatot, melyet későbbi számításoknál felhasználunk.

II. TÁBLÁZAT

j	v_j (μ/sec)	Δt_j (sec)	Δl_j (μ)	d_j (μ)
Tűkristály (w)	12,3	4,2	3,6	51,9
Normális (n)	2,6	—	—	—
Réteg (s)	4,8	6,5	5,0	31,3

Diszkusszió

A Burton—Cabrera—Frank elmélet szerint [2] az oldat relatív túltelítettsége (σ) és egy csavardiszlokáció útján növekedő kristályfelület normális irányú sebessége (v_n) közt nagyobb túltelítettségek tartományában (mint esetünkben is) a következő összefüggés áll fenn:

$$v_n = \frac{DN_0\Omega}{\delta}\sigma \quad (2)$$

ahol D — az oldatban az ionok diffúziókonstansa,

N_0 — ionok sűrűsége telített oldatban,

Ω — egy ion térfogata a kristályban,

δ — a kristálykörüli diffúziós réteg vastagsága.

Függetlenül attól, hogy a növekedési réteg (elemi rétegek kötegei) atomáris *elemi rétegei* csavardiszlokációkból vagy kétdimenziós felületi magokból származtak, ilyen rétegek kötegei tangenciális sebessége (v_s) és a felület normális irányú növekedési sebessége között

$$v_n = \frac{a}{y_0} v_s \quad (3)$$

összefüggés áll fenn, ahol

a — elemi rétegek magassága,

y_0 — két szomszédos elemi lépcső közti távolság.

Ha $N_0 = 6,9 \cdot 10^{21}$ ion/cm³,

$\Omega = (r_k + r_{Br-})^3 \approx 3,6 \cdot 10^{-23}$ cm³,

$D \approx 1,5 \cdot 10^{-5}$ cm²/sec,

$\delta_w \approx 10^{-3}$ cm (tűkristályra),

$\sigma \approx 0,4$ becsült értéket (2)-egyenletbe beírjuk, a tűkristály axiális (homlok-felület normális irányú) növekedési sebességére $v_w \approx 9,0$ μ /sec eredményt kapjuk, amely a II. táblázatbeli 12,3 μ /sec értékkel tűrhető egyezésben van. Meggondolva, hogy a diffúziós réteg vastagsága egy kiterjedt nagyobb kristályfelület környékén (δ_n) nagyobb kell legyen, mint tűkristály esetén (δ_w), (2) egyenlet alapján $v_w > v_n$ eredményre jutunk.

Lemezszerű kristályok réteges növekedésével kapcsolatosan a II. táblázatból

$\frac{v_s}{v_n} = 1,8$ hányadost nyerjük. A növekedési rétegek profiljának vizsgálatából $\frac{y_0}{a} \approx 1 - 5$ közti értékek adódnak. A két hányados összehasonlításából láthatjuk, hogy (3) összefüggés jó közelítéssel fennáll. Ez utóbbi eredmény meglehetősen érdekes, mivel a kristályfelületen végbemenő „felületi” diffúziós folyamatokra fontos információt tartalmaz. Éspedig: a (3) egyenlettel kapcsolatos eredeti levezetésekben mindig feltételezték, hogy $y_0 \gg a$, amely feltételezés biztosította az egyes elemi lépcsők körüli diffúziós terek egymástól való függetlenségét. Ezt a függetlenséget tartalmazza tehát a (3) egyenlet is. Mint láttuk a (3) egyenlet esetünkben is fennáll, holott az eredeti $y_0 \gg a$ messze nem teljesül. Tehát esetünkben is fennáll az elemi lépcsők diffúziós tereinek függetlensége pedig az elemi lépcsők közti távolságok atomi ill. néhány atom méretűek csak ($a \leq y_0 \leq 5a$). Az egyes elemi lépcsők diffúziós terei viszont csak akkor lehetnek egymástól függetlenek, ha — hengerszerű diffúziós teret véve a lépcsőkonturok mentén — a diffúziós tér átmérője ($2r$) kisebb, mint

a lépcsők közti távolság, azaz $a \leq 2r < 5a$. Ez azt jelenti, hogy az adott körülmények között (viszonylag nagy túltelítettségek mellett) a növekedési réteget alkotó elemi lépcsőknek igen kis környezetében a növekedéshez szükséges anyag szinte közvetlenül rendelkezésre áll, ami csak az ionok meglehetősen nagy dehidratációs foka mellett lehetséges.

Mivel a (2) formula az átlagos növekedési sebességet — konkrét, kísérleti adatokat ill. az irodalomban is szokásos becslési adatokat felhasználva — viszonylag jól képes visszaadni, várható, hogy segítségével a sebességingadozásokra is magyarázatot nyerhetünk. A kísérletek szerint a relatív sebességingadozás $\frac{\Delta v}{\bar{v}} \approx 0,6 - 1,3$ közt mozog. A (2) egyenletben szereplő paraméterek (D , σ) hőmérsékletingadozás következtébenei relatív ingadozásait figyelembevéve a fenti $\frac{\Delta v}{\bar{v}}$ -nak csak tört részeit tudjuk magyarázni. Fel kell tételeznünk, hogy az oldatban lokális relatív túltelítettség ingadozások lépnek fel és az észlelt sebességingadozásokat gyakorlatilag ezek okozzák, azaz

$$\frac{\Delta v}{\bar{v}} = \frac{\Delta \sigma}{\bar{\sigma}}. \quad (4)$$

Ilyen nagy lokális relatív túltelítettség ingadozások magyarázatához a következő megfontolásokat végezzük. Egy oldat átlagos relatív túltelítettsége meghatározza egy ion körüli hidratburokban levő oldószer molekulák (esetünkben a vízmolekulák) átlagos számát (hidratáció-fok). Az oldatban valójában ennél kevesebb vízmolekulával rendelkező ún. dehidratált ionok is jelen vannak, melyek egymással asszociálódva kis térfogatú *asszociátumokat* képezhetnek, melyen belül tehát az egy ionra eső vízmolekulák száma átlagosan kisebb, mint az oldatban, azaz a túltelítettség nagyobb. Az asszociátumok atomos szerkezete kissé más, mint a környező oldaté általában, de még nem kristályos szerkezet. Az oldatot úgy tekinthetjük, mint különböző hidratáció-fokú egyes ionok és asszociátumaik valamilyen halmaza.

Ismeretes, hogy a fázishatárokon fellépő felületi feszültség a fázishatáron fekvő részecskék körüli nem gömbszimmetrikus erőter következménye. Az erőter gömbszimmetriától való eltérését viszont a két érintkező fázis strukturális különbsége okozza. A két fázis strukturális különbözősége határozza meg tehát a fellépő fajlagos felületi energiát. Ha ez a különbség csökken a felületi energia is csökken. Ezt a megfontolást az előbb említettekre alkalmazva azt mondhatjuk, hogy az asszociátumok az oldatban a környezetükhöz képest (átlagos oldat fázis) egy *más* (nem kristályos) *fázist* képviselnek. Így az ionasszociátumok képződésére ill. egyensúlyi eloszlására a heterofázisú fluktuációk Frenkel-féle elméletét [12] alkalmazhatjuk.

Tekintsük az asszociátumokat egyszerűség kedvéért azonos dehidratációs fokúaknak. Jelöljük g -vel egy asszociátumhoz tartozó dehidratált ionok számát, és $\mu g^{2/3}$ alakban vegyük fel az illető asszociátum felületi energiáját. Akkor Frenkel szerint az asszociátumok méret (g) szerinti eloszlására *egyensúly esetében* a következő összefüggés áll fenn

$$N(g) = C^* \exp \left\{ -\frac{\mu g^{2/3}}{kT} \right\} \quad (5)$$

Asszociátumok *stacionárius képződésére* pedig

$$f(g) = CN(g), \quad (6)$$

ahol $N(g)$ ill. $f(g) = \frac{g \text{ méretű asszociátumok száma az oldatban}}{\text{oldattérfogat}}$ egyensúly ill. stacionárius képződés esetére

k — Boltzmann-állandó,
 T — abszolút hőmérséklet,
 C^* — állandó,

C — g -nek és egy G paraméternek olyan függvénye, hogy

$$[f(g)]_{g=G} = 0. \quad (7)$$

(6) összefüggés alapján $f(g)$ a g -vel exponenciális-szerűen csökken. Segítségével tehát a kísérletekből kapott (1) közelítő összefüggésünket legalábbis kvalitatíve — μ , a dehidratizáció fokának igen bonyolult függvénye lévén, nem ismeretes — magyarázhatjuk. Éspedig: $\Delta v_{j,i}$ (ill. $\Delta l_{j,i}$) értékek bizonyos dehidratáció fokú ($\Delta\sigma$), bizonyos méretű (g) asszociátumoknak felelnek meg, ahol $\Delta\sigma$ valamilyen mértéke a környezet és az asszociátum közti strukturabeli különbségnek, azaz $\Delta\sigma$ (ill. Δv) növekedésével nő az asszociátum fajlagos felületi energiája, azaz előfordulásának relatív gyakorisága csökken.

A 8. ábrával ill. a II. táblázattal kapcsolatosan láttuk, hogy az ingadozások (azaz az asszociátumok), gyakorisága ill. átlagos térbeli kiterjedése növekedési rétegek esetén nagyobb, mint túkristályok esetére, azaz

$$[f(g)]_w < [f(g)]_s \quad (8)$$

legalábbis (lásd 8. ábrát) egy bizonyos g^* -nél nagyobb g értékekre. (Itt g^* konstans valószínűleg amiatt lép fel, mert a túkristály körül relative nagy szabad oldattér áll rendelkezésre a statisztika kialakítására, míg a növekedési rétegeknél szerepet játszó, a kristályfelület közvetlen környezetében fekvő oldatréteg térfogata az előbbihez képest kicsi.) (8) egyenlőtlenség csak úgy állhat fenn, ha átlagosan a tük esetén szereplő asszociátumok felületi energia faktorára (μ_w) és a növekedési rétegnél szereplőkére (μ_s) fennáll

$$\mu_w > \mu_s. \quad (9)$$

Azaz a kristályfelület közvetlen közelében fekvő oldatréteg magasabb dehidratáció-fokú (koncentrációjú) átlagosan, mint a „szabad” oldat (tük), hiszen a magasabb dehidratáció fokot (koncentrációt) képviselő asszociátumokhoz közelebb eső struktúrájú. *Gyulai* után [13] ezt az oldatréteget „féligrandezett határrétegnek” vagy röviden *határrétegnek* nevezzük.

Számoljuk ki a továbbiakban az asszociátumok formájában felhalmozott anyagmennyiséget egy kis Q keresztmetszetű, L hosszúságú oszlopban „szabad” oldat esetére (túkristály) illetőleg a határréteg esetére (növekedési réteg). Az L hosszúságon található asszociátumok átlagos száma $\frac{L}{d_j}$. Tételezzük fel egyszerűség

kedvéért, hogy az asszociátumok azonos koncentrációjúak (c), akkor a kérdéses anyagmennyiség

$$m_j = \frac{L}{d_j} \Delta l_j Qc \quad (10)$$

(10) egyenletet az említett két esetre külön-külön alkalmazva nyerjük:

$$\frac{m_s}{m_w} = \frac{d_w \Delta l_s}{d_s \Delta l_w} = \frac{v_w \Delta t_w \Delta l_s}{v_s \Delta t_s \Delta l_w} \quad (11)$$

A II. táblázat adatait beírva $\frac{m_s}{m_w} = 2,3$ hányadost kapjuk. Korábbi fáziskontraszt-mikroszkópos vizsgálataink szerint [14], ha c_0 jelenti a határretegbeli koncentrációt, c_∞ pedig az oldat koncentrációját a kristálytól távol, akkor $\frac{c_0}{c_\infty} \approx 1,2-3$. A két mérési eredmény elég jól egyezik.

Még egy kérdést kell röviden tisztáznunk: Miért stabilok relatíve az asszociátumok, miért nem kristályosodnak? Egyrészt az ionok dehidratációfokának növekedésével nő a további dehidratációhoz szükséges aktivációs energia, azaz az asszociátumok élettartama. Másrészt meg kell említenünk, hogy kísérleteink folyamán új kristályok képződését mindig megfigyelhettük.

Szeretnék köszönetet mondani *Gyulai Zoltán* akadémikus úrnak vizsgálataim iránti állandó szíves érdeklődéséért és jó tanácsaiért, a Szovjet Tudományos Akadémia Krisztallográfiai Intézete Kollektívájának, hogy lehetővé tették számomra jelen munkám ismertetését s alapos diszkusziójukkal nagy segítségemre voltak, *Vannay Lászlónak* a diagrammok elkészítéséért.

IRODALOM

- [1] F. Bernauer, Neues Jahrb. für Mineralogie 56, 342, 1928.
- [2] W. Burton, N. Cabrera, F. Frank, Phil. Trans. (A) 243, 299, 1959.
- [3] B. Honigmann: Gleichgewichts — und Wachstumsformen von Kristallen. Darmstadt. 1958. 84—89. old. 5. táblázat.
- [4] Z. Gyulai, Zs. f. Kristallographie (A) 91, 142, 1935.
- [5] C. W. Bunn, H. Emmett, Disc. Farad. Soc. 5, 119, 1949.
- [6] Z. Gyulai, Acta Phys. Hung. 2, 425, 1956.
- [7] A. P. Kaszarkin, Kristallografija 10, 550, 1965.
- [8] L. Malicskó: Sbornik referatu IV. Konf. o monokrystalech. Turnov. 171. 1961.
- [9] Malicskó L., Magy. Fiz. Folyóirat 9, 415, 1961.
- [10] L. Malicskó, Phys. Stat. Sol. 3, 1547, 1963.
- [11] Malicskó L., Magy. Fiz. Folyóirat 11, 501, 1963.
- [12] J. I. Frenkel: Kinetische Theorie der Flüssigkeiten, Berlin. 1957.
- [13] Z. Gyulai, S. Bieleck, Acta Phys. Hung. 1, 199, 1952.
- [14] G. Domokos, L. Malicskó, Acta Phys. Hung. 10, 185, 1959.
- [15] Z. Gyulai, Acta Phys. Hung. 10, 371, 1959.

JELALAKDISZKRIMINÁCIÓS PLASZTIK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA*

BINDER GYULA és KISS GÁBOR

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest Elektronikus Főosztály

A jelalakdiszkriminációs plastik együtt jelentkező gyorsneutron és gamma sugárzás szcintillációs jeleinek szétválogatására és így a kétféle sugárzás párhuzamos mérésére használható. Az egyetlen ilyen célokra alkalmas, kereskedelmi forgalomban kapható műanyag szcintillátor a Nuclear Enterprises cég NE 150 típusú jelalakdiszkriminációs plastikja, amely azonban alacsony lágyuláspontja (40°C) miatt nem használható univerzálisan. Vizsgálataink azt mutatták, hogy előállítható jelalakdiszkriminációs képesség szempontjából az NE 150 típustól csak kevésbé eltérő plastik, melynek lágyulási pontja megegyezik az általánosan használt normál műanyag szcintillátorokéval (75°C).

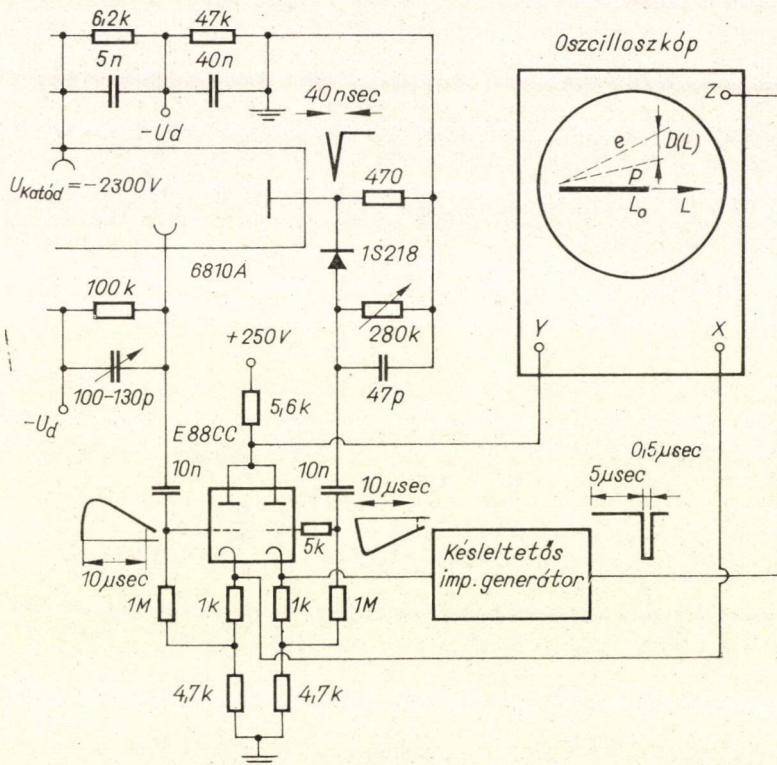
A szcintillációs jelek időbeli lefutásukat tekintve általában két komponensből állnak és e gyorsnak és lassúnak nevezett komponensek relatív mennyisége a gerjesztő részecskék típusa szerint változik. A komponensekből alkalmasan súlyozott különbségek képzése útján a jelalakeltérés ellenkező polaritású jelekké alakítható át. Ezután a megfelelő polaritással történő kapuzás lehetővé teszi a részecske-típusok jeleinek elkülönítését. A részecsketípusok jelalak szerinti megkülönböztetése akkor válik szükségessé, amikor a zavaró részecsketípus hatása árnyékolással nem küszöbölhető ki. Ilyen eset a gyorsneutronok detektálása erős gamma háttérben, amikor a szcintillátor megválasztásánál a jelalakdiszkriminációs képesség mellett a gyorsneutron detektálási határfok, a térfogati hidrogén koncentráció is lényeges szempont. Ezen kívánalmaknak leginkább a stilben kristály tesz eleget, de érdemes figyelmet fordítani a plastik szcintillátor ilyen irányú felhasználhatóságára is. Jelalakdiszkriminációs plastikról Brooks [1] számolt be először. Az általa közölt kémiai összetétellel és előállítási móddal a Nuclear Enterprises cég hozott forgalomba NE 150 jelzéssel egy plastikot. Bár e plastiknál a neutron- γ részecskék elkülönítése csak 3-szor nagyobb γ energiáknál lehetséges mint a stilben esetében, mégis a plastikkal amellet, hogy a térfogati hidrogén koncentrációja is valamivel magasabb, főleg különleges geometriák, nagy méretek esetén a stilbennél feltétlenül egyszerűbb technológiájú és olcsóbb megoldáshoz jutunk. A Brooks plastik hátrányos tulajdonsága, hogy 40°C -on meglágyul, így alakja könnyen deformálódik. Ez az alacsony lágyuláspont az izopropil-bifenil tartalom miatt lép fel. Az [1] közleményből nem derül ki az, hogy mennyiben befolyásolja a jelalakdiszkriminációs képességet az izopropil-bifenil. Vizsgálataink e kérdésre is igyekeztek feleletet adni.

Az NE 150 jelzésű plastikban is szereplő p-terfenil és POPOP szcintillátor anyagok felhasználásával különféle százalékos összetételű, poliviniltoluol alapú plastik szcintillátorok egész sorát állítottuk elő. Az előállításnál fokozott figyelmet fordítottunk az oxigénmentes viszonyokra, ugyanis ez látszik jelalakdiszkrimináció szempontjából a legfontosabb tényezőnek. A szcintillációs mechanizmusra vonatkozó vizsgálatok [2] szerint a lassú komponens léte az ionrekombináció függ-

* Érkezett: 1965. dec. 10.

vénye és ezért kívánatos az elektronakceptor, esetünkben az oxigén távolléte. Az NE 150 jelzésű plasztik és a saját gyártmányú plasztikok azonos méretben ($\varnothing 25 \times 5$ mm) és azonos alumíniumfóliás montírozással kerültek bemérésre.

Mérőberendezésünk a válogatókör kapcsolásával és a többi egységek sematikus ábrázolásával az 1. ábrán látható. A válogatókör Brooks [1] megoldásától eltérően a különbséget elektroncsöves kapcsolással állította elő. Ennek az az előnye, hogy



1. ábra

1. az oszcilloszkóp függőleges erősítésével már kielégítő különbségi jel-nagysághoz jutunk,

2. a teljes fényhozammal arányos jel előállítására, mely az oszcilloszkóp vízszintes eltérítő lemezeire kerül, nem kell újabb dinódát felhasználni,

3. az impulzusgenerátor indítására, mely 5 μsec -os késleltetés után 0,5 μsec -ig kivilágítja a nyaláb pályáját, egyszerű lehetőség nyílik.

Mivel a kivilágítás időszakában a jelek csak keveset változnak, a részecskét egy pont képviseli az oszcilloszkóp ernyőjén. A pontok, mint a 2—4. ábrák is mutatják, egyenesek mentén helyezkednek el (az egyenestől való elhajlás nagy fényhozamoknál a multiplier tértöltése miatt lép fel).

A két felső egyenest a Po—Be forrással történt besugárzáskor a Compton-elektronokból és meglökött protonokból származó pontok hozzák létre. A víz-

szintes tengelyen levő egyenes darab a Co—60 közel 1 MeV-es maximális Compton-elektronjainak megfelelő fényhozam, vonatkoztatási értéként szerepel ábráinkon. (A felvétel ezen részét izotópcsere után a függőleges bemenet kiiktatásával készítettük.) A felvételek azonos vízszintes és függőleges erősítés mellett készültek.

A válogatóképesség értékelésére Owen [3] egy olyan mennyiséget vezetett be, amely a jelalakok részecsketípusonkénti változására jellemző, de a szcintillátorok fényhozambeli eltéréseit nem veszi figyelembe. Mások [4] a nyerhető relatív információt vették összehasonlítási alapul. Ilyen paraméter pl. a közel 1 MeV-es elektronoknak megfelelő fényhozamnál (L_0) az egyenesek között mérhető távolságok $D(L_0)$ aránya. A mi esetünkben $L_0 \approx L'_0$ (ahol a vessző, mint index az NE 150 típuson mért értékeket jelzi), ezért

$$\frac{D(L_0)}{D'(L'_0)} = \left(\frac{D}{D'} \right)_L. \quad (1)$$

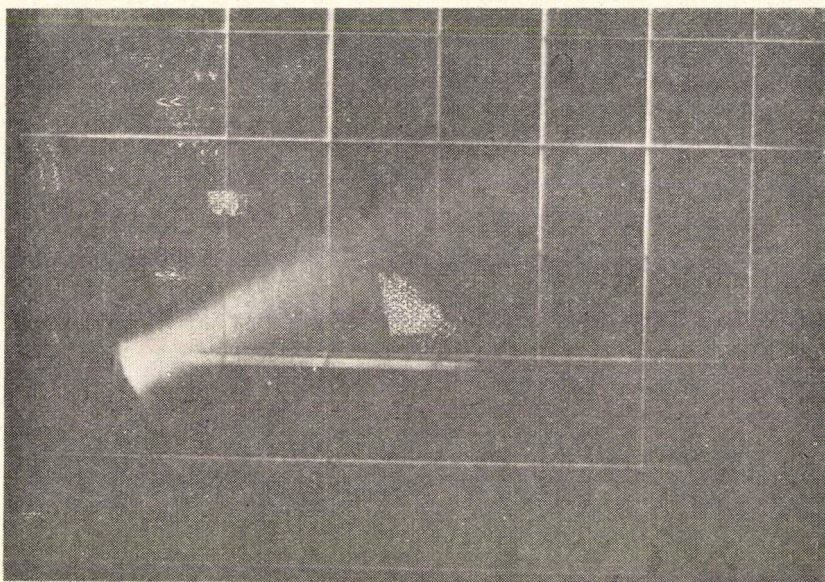
A felvételeken látható, hogy egy meghatározott fényhozam érték alatt a részecskét jellemző pontszerű felvillanások hovatarozása már nem dönthető el. E fényhozamhoz tartozó minimális elektron vagy proton energia a szcintillátor legfontosabb jellemzője. Az energiaküszöbök mérése meglehetősen bonyolult berendezést kíván [1]. Ennek megkerülésére egy elméleti számítás [5] ad lehetőséget, mely a minimális elektronenergiák arányát egyszerűen meghatározható mennyiségekkel hozza kapcsolatba. Mivel a felvételeken az egyenesek irányítottága közel azonos, az [5]-ben közölt kifejezés tovább egyszerűsödik

$$\frac{E_{\min}}{E'_{\min}} \approx \frac{L'_0}{L_0} \left(\frac{D'}{D} \right)_L \approx \left(\frac{D'}{D} \right)_L. \quad (2)$$

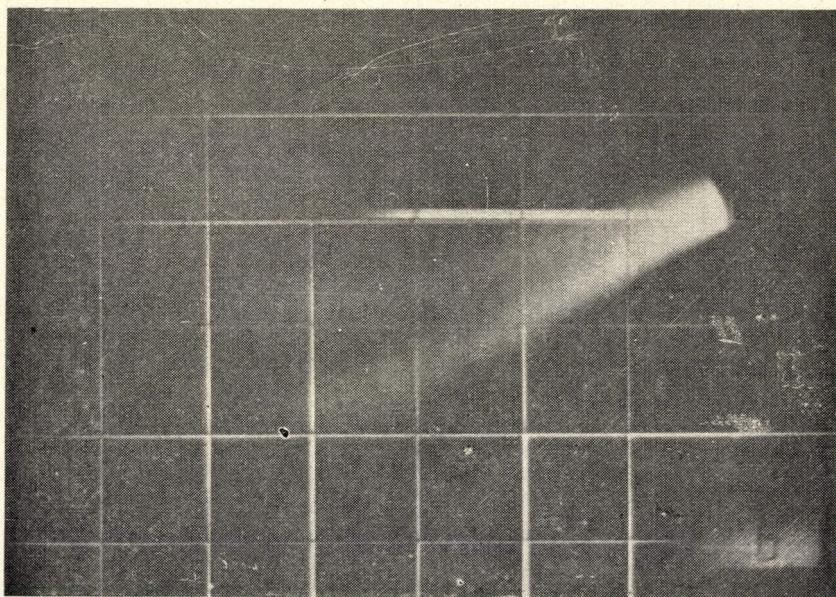
Felvételeink alapján meghatároztuk az (1) és (2) alatt szereplő mennyiségeinket. A vonatkoztatás az NE 150 típusú plastikra történt.

A $\left(\frac{D}{D'} \right)_L$ oszlopban szereplő adatok leolvasásból eredő maximális hibája $\pm 10\%$. Az eredmények alapján a válogatási effektus nagysága a p-terfenil súly-

Ábra szám	Kémiai összetétel		Megjegyzés	$\left(\frac{D}{D'} \right)_L$	$\frac{E_{\min}}{E'_{\min}}$
	p-terfenil	POPOP			
2.	2 %	0,06%	saját készítésű	0,5	4
	2,5%	0,06%		0,7	2
	3 %	0,06%		0,75	1,8
	3,5%	0,06%		0,8	1,6
3.	4 %	0,06%		0,9	1,2
	3,5%	0,01%		0,8	1,6
	3,5%	0,1 %		0,75	1,8
4.	3,5%	0,05%	NE 150	1,0	1,0

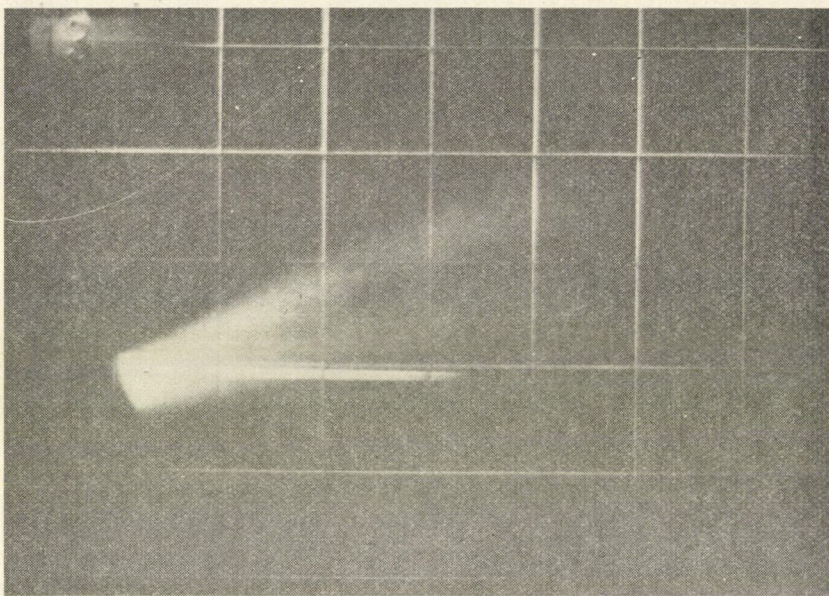


2. ábra



3. ábra

százalékával monotonon nő, a POPOP tartalomtól viszont csak kevésbé függ. Sajnos a p-terfenil nagyobb súlyszázalékainak előállítása nem járt sikerrel. Látható az is, hogy az izopropil-bifenil jelenléte az NE 150 plasztikban nem döntő jelentőségű.



4. ábra

Az $\frac{E_{\min}}{E'_{\min}}$ oszlop adatainak a leolvasásból eredő maximális hibája $\pm 20\%$.

Ehhez hozzáadódhat a számításnál feltételezett és a mérésnél megvalósított körülmények eltéréséből $\pm 10\%$. Így ezek az adatok inkább csak tájékoztató jellegűek. Annyi mindenesetre leolvasható belőlük, hogy nagyobb energiák esetén alkalmas jelalakdiszkriminációra a kereskedelemben kapható normál összetételű plasztik is, ha azt oxigén mentes körülmények között (pl. vákuumpolimerizáció) állították elő. (2. ábra), A 4% p-terfenil és 0,06% POPOP tartalmú szcintillátor jelalakdiszkriminációs szempontból gyakorlatilag egyenértékű az NE 150 jelzésű plasztikkal és fizikai-mechanikai tulajdonságait tekintve lényegesen jobb (lágyulási pontja 75°C).

Befejezésül szeretnénk köszönetet mondani Csákány Antal és Serf Egyed kollegáknak az elektronikus megoldások terén nyújtott hasznos segítségükért.

IRODALOM

- [1] Brooks, F. D., Pringle, R. W., Funt, B. L., IRE Trans. NS-7, No. 2—3. 35, 1960.
- [2] Birks, J. B., IRE Trans. NS—11, No. 3. 4. 1964.
- [3] Owen, R. B., Nuclear Electronics (Soc. Francaise des Radioelectriciens), Vol. 1. 27, 1959.
- [4] Funsten, H. O., Cobb, G. C., Rev. Sci. Instr. 31, 571, 1960.
- [5] Kiss, G., KFKI Közlemények 14, 173, 1966.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

AZ ÜTKÖZÉSI FOLYAMATOK KVANTUMMECHANIKÁJA*

MAX BORN

A kvantummechanika Schrödinger-féle alakja lehetővé teszi, hogy természetes módon definiáljuk valamely állapot gyakoriságát. Ez a gyakoriság az állapothoz rendelt sajátrezgés intenzitása segítségével definiálható. Ez a felfogás elvezet az ütközési folyamatok elméletéhez, melyben az átmeneti valószínűségeket az aperiódikus megoldások aszimptotikus viselkedése határozza meg.

Bevezetés. Az ütközési folyamatok nem csupán a legmeggyőzőbb kísérleti tényeket szolgáltatták a kvantumelmélet alapfeltevéseinek igazolására, hanem arra is alkalmasságnak látszanak, hogy tisztázni segítsenek az ún. „kvantummechanika” formális törvényeinek fizikai jelentését. Ez ugyan — úgy látszik — mindenkor a helyes értékeket szolgáltatja a stacionárius állapotok termjeire s az átmenetek során kisorszárt rezgések amplitúdóit is helyesen adja, a képletek fizikai értelmezését illetően azonban megoszlanak a vélemények. A kvantummechanika *Heisenberg*-től megalapozott, és általa *Jordannal* és e dolgozat szerzőjével együttműködésben kidolgozott mátrixalakjának [1] kiindulópontját az a gondolat képezte, hogy a folyamatok egzakt téridőbeli leírása egyáltalán nem lehetséges; így az beéri megfigyelhető mennyiségekre vonatkozó összefüggések felállításával, melyek csak a klasszikus határesetben értelmezhetők mozgások tulajdonságaiként. *Schrödinger* [2] ezzel szemben — úgy látszik — a hullámoknak, melyeket ő *de Broglie* nyomán az atomi folyamatok hordozójának tekint, ugyanolyan fajta realitást tulajdonít, mint amilyen a fényhullámok rendelkeznek; megkísérli „hullámsomagok szerkesztését, melyek minden irányban viszonylag kis kiterjedésűek” és amelyek nyilván közvetlenül személyesítenék meg a mozgó korpuszkulát.

E két felfogás egyike sem látszik számomra kielégítőnek. Szeretném megkísérlni, hogy itt egy harmadik értelmezést adjak és annak használhatóságát az ütközési folyamatok esetében vessem próbának alá. Ezek az elgondolások *Einstein* egy megjegyzéséhez kapcsolódnak, melyet a hullámtér és a fénykvantumok viszonyáról tett; olyasmit mondott, hogy a hullámok dolga pusztán utat mutatni a korpuszkuláris fénykvantumok számára, és ebben az értelemben „kísértet-tér”-ről beszélt. Ez határozza meg annak valószínűségét, hogy a fénykvantum, mely az energia és az impulzus hordozója, valamely meghatározott úton haladjon; a térnek magának azonban nincs sem energiája, sem impulzusa.

Ennek a gondolatnak közvetlen kapcsolatba hozását a kvantummechanikával jobbnak látszik mindaddig elhalasztani, míg meg nem történik az elektromágneses tér beillesztése a formalizmus kereteibe. A fénykvantum és az elektron között fennálló, teljes mértékű analógia alapján azonban arra gondolhatunk, hogy az elektro-

* ZS. f. Phys. 38, 803, 1926. (Egy rövid előzetes közlemény: ZS. f. Phys. 37, 863, 1926.)

nok mozgástörvényeit hasonlóképpen fogalmazzuk meg. Kézenfekvő itt a de Broglie—Schrödinger-féle hullámokat „kísértet-térnek” vagy inkább „vezérlő térnek” tekinteni.

Kísérletképpen tehát a következő felfogást szeretném alapul venni: A „vezérlő tér”, melyet a szereplő részecskék koordinátáinak, valamint az időnek egy ψ skaláris függvénye ír le, a Schrödinger-féle differenciálegyenlet szerint terjed tovább. Az impulzus és az energia átadása azonban úgy történik, mintha ténylegesen részecskék (elektronok) röpködnek ide-oda. E részecskék pályái csupán oly mértékben vannak meghatározva, amilyen mértékben azokat az energia- és impulzustétel korlátozza; egyébiránt annak valószínűségét, hogy a részecske valamely meghatározott pályán haladjon, a ψ függvényértékek eloszlása határozza meg. Némileg paradox módon ezt talán így fejezhetnénk ki összefoglalóan: A részecskék mozgása valószínűségi törvényeket követ, maga a valószínűség azonban az okság elvével összhangban terjed tovább [3].

Ha végigpillantunk a kvantumelmélet három fejlődési fokán, úgy látjuk, hogy a legelső fok, a periodikus folyamatok szintje, teljesen alkalmatlan arra, hogy ott ezen felfogás használhatóságát próbának vessük alá. Valamivel több lehetőséget nyújt a második szint, az aperiodikus stacionárius folyamatoké; ezekkel kívánunk a jelen dolgozatban foglalkozni. Igazán azonban csak a harmadik fokozat, a nem-stacionárius lefolyást mutató jelenségek szintje hozhat döntést; itt kell megmutatkoznia, vajon a csillapított „valószínűségi hullámok” interferenciája elégséges-e azon jelenségek magyarázatára, amelyek — úgy látszik — a tértől s az időtől független csatolás létre utalnak.

A fogalmak precizizálása csak a matematikai megfogalmazás [4] keretei között lehetséges; most nyomban erre térünk rá, hogy magára a hipotézisre majd később térjünk vissza.

1. §. *A súlyok és a gyakoriságok definíciója periodikus rendszerekre.* Kiindulásképpen álljon itt egy teljesen formális megfontolás valamely nem-elfajult rendszer diszkrét stacionárius állapotairól. Jellemezze ezeket *Schrödinger*

$$[H - W, \psi] = 0 \quad (1)$$

differenciálegyenlete. A sajátfüggvényeket normáljuk 1-re [5]:

$$\int \psi_n(q) \psi_m^*(q) dq = \delta_{nm}. \quad (2)$$

Tetszőleges $\psi(q)$ függvény kifejezhető a sajátfüggvények szerint:

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q). \quad (3)$$

Figyelmünket eddig csak a ψ_n sajátrezgésekre és a W_n sajátértékekre irányítottuk. A bevezetésben kifejtett felfogásunk kézenfekvővé teszi a gondolatot: a (3) képlet előállította szuperponált függvényt hozzuk kapcsolatba annak valószínűségével, hogy azonos kölcsönhatásmentes atomok adott halmazában az egyes állapotok meghatározott gyakorisággal lépjenek fel.

Az

$$\int |\psi(q)|^2 dq = \sum_n |c_n|^2 \quad (4)$$

teljességi reláció arra a gondolatra vezet, hogy ezt az integrált az atomok számának tekintsük. Ez ugyanis az egyes normált sajátrezgések felléptére az 1 értéket szolgáltatja (vagyis: az állapotok *a priori* súlya 1), $|c_n|^2$ az n indexű állapot gyakoriságát is jelenti, s a teljes szám e járulékokból additive tevődik össze.

Ezen értelmezés igazolása céljából vegyük szemügyre egy tömegpont mozgását a háromdimenziós térben az $U(x, y, z)$ potenciális energia hatása alatt; ekkor az (1) differenciálegyenlet így fest:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (W - U)\psi = 0. \quad (5)$$

Helyettesítsük be ide W helyére a W_n sajátértéket, ψ helyére a ψ_n sajátfüggvényt, szorozzuk meg az egyenletet ψ_m^* -gal és integráljunk a térre ($dS = dx dy dz$); kapjuk:

$$\iiint \left\{ \psi_m^* \Delta\psi_n + \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (W_n - U)\psi_n \psi_m^* \right\} dS = 0.$$

A Green-tétel alapján, a (2) ortogonalitási tételek tekintetbe vételével nyerjük a

$$\delta_{mn} W_n = \iiint \left\{ \frac{h^2}{8\pi^2\mu} (\text{grad } \psi_n \cdot \text{grad } \psi_m^*) + U\psi_n \psi_m^* \right\} dS \quad (6)$$

eredményt. Minden egyes energianívó felfogható mint a sajátrezgések energiasűrűségének térfogat szerint képezett integrálja.

Képezzük most a megfelelő integrált tetszőleges ψ függvény esetére:

$$W = \iiint \left\{ \frac{h^2}{8\pi^2\mu} |\text{grad } \psi|^2 + U|\psi|^2 \right\} dS; \quad (7)$$

erre a (3) sorfejtés behelyettesítésével a

$$W = \sum_n |c_n|^2 W_n \quad (8)$$

kifejezést kapjuk. A $|c_n|^2$ alapul vett értelmezése szerint a jobb oldal az atomok valamely rendszere összenergiájának középértékét szolgáltatja; ez a középérték eszerint előállítható, mint a ψ függvény energiasűrűségének térfogati integrálja.

Ezen kívül azonban nem hozhatunk fel semmilyen lényeges szempontot felfogásunk alátámasztására mindaddig, amíg periodikus folyamatokra szorítkozunk.

2. §. *Aperiodikus rendszerek.* Rátérünk tehát az aperiodikus folyamatokra, s először az egyszerűség kedvéért az x -tengely mentén végzett egyenesvonalú egyenletes mozgást vesszük szemügyre. A differenciálegyenlet most a

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad \left(k^2 = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} W \right) \quad (1)$$

alakú; a sajátértékek: valamennyi pozitív W érték, a sajátfüggvények:

$$\psi = ce^{\pm ikx}.$$

Ahhoz, hogy itt súlyokat és gyakoriságokat definiálhassunk, mindenekelőtt nor-

málnunk kell a sajátfüggvényeket. Az 1. § (2)-vel analóg integrál-képlet nem alkalmazható (az integrál divergens); kézenfekvőnek látszik, hogy ahelyett a

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2a} \int_{-a}^{+a} |\psi(k, x)|^2 dx = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{c^2}{2a} \int_{-a}^{+a} e^{ikx} e^{-ikx} dx = 1 \quad (2)$$

„középértéket” használjuk; innen $c=1$ következik, így a *normált sajátfüggvények*:

$$\psi(k, x) = e^{\pm ikx}. \quad (3)$$

Az x változó bármely függvénye összehajtható ilyenekből. Meg kell azonban még választanunk a mértékegységet a k -skálán, azaz: meg kell állapítanunk, mely szakaszhoz tartozzék egységnyi súly. Ebből a célból a szabad mozgást mint periodikus mozgás határesetét, az x -tengely egy véges szakaszához tartozó sajátrezgések határesetét fogjuk fel. E sajátrezgések hosszegysége s a $(k, k + \Delta k)$ közre vonatkoztatott száma $\frac{\Delta k}{2\pi} = \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)$, hol λ a hullámhosszúság. Így írható:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \psi(k, x) d \frac{k}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} dk, \quad (4)$$

ahol

$$c(-k) = c^*(k); \quad (5)$$

azt várjuk, hogy $|c(k)|^2$ lesz az $\frac{1}{2\pi} dk$ közhöz tartozó gyakoriság mértéke.

Az atomok valamely halmaza esetében, melyben a sajátfüggvények a $c(k)$ -val megadott eloszlásnak megfelelően lépnek fel, az atomok számát állítsa elő az 1. § (4)-gyel analógiában az

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} dk \right|^2 \quad (6)$$

integrál. Vegyük szemügyre azt az esetet, amikor csak a $k_1 \leq k \leq k_2$ kicsiny köz van elfoglalva; ekkor

$$\int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} dk = \bar{c} \int_{k_1}^{k_2} e^{ikx} dk = \frac{\bar{c}}{ix} (e^{ik_2 x} - e^{ik_1 x}),$$

a hol \bar{c} alkalmas középértéket jelöl. Kapjuk:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx &= \frac{|\bar{c}|^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2} (e^{ik_2 x} - e^{ik_1 x}) (e^{-ik_2 x} - e^{-ik_1 x}) = \\ &= \frac{|\bar{c}|^2}{4\pi^2} 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2} \sin^2 \frac{k_2 - k_1}{2} x = \frac{1}{2\pi} |\bar{c}|^2 (k_2 - k_1). \end{aligned}$$

A haladó mozgás impulzusa, mely a (3) sajátfüggvényhez tartozik, *de Broglie* szerint

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k. \quad (7)$$

Talán nem felesleges megjegyezni, hogy ez is felfogható, mint „mátrix”; a folytonos spektrumban azonban a mátrixokat nem integrálokkal, hanem középértékekkel kell definiálni, itt tehát

$$\begin{aligned} p(k, k') &= \frac{h}{2\pi i} \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2a} \int_{-a}^{+a} \psi^*(k, x) \frac{\partial \psi(k', x)}{\partial x} dx = \\ &= \frac{h}{2\pi i} \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2a} \int_{-a}^{+a} e^{-ikx} ik' e^{ik'x} dx; \\ p(k, k') &= \begin{cases} \frac{h}{2\pi} k, & \text{ha } k = k', \\ 0, & \text{ha } k \neq k'. \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

Helyettesítsük itt $\Delta k = k_2 - k_1$ -et $\frac{2\pi}{h} \Delta p$ -vel; így nyerjük végül:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |\bar{c}|^2 \frac{\Delta p}{h}. \quad (9)$$

Ezzel megkaptuk az eredményt — összhangban *Sackur* és *Tetrode* [6] a tapasztalat-tól sokszorosán igazolt feltevésével — hogy a $\Delta x = 1$ hosszhoz s a $\Delta p = h$ impulzus-közhöz tartozó cellának egységnyi súly felel meg, és hogy $|c(k)|^2$ a $p = \frac{h}{2\pi} k$ impulzusú mozgáshoz rendelt gyakoriság.

Térjünk most át a gyorsuló mozgásokra. Itt természetesen magában véve hasonlóképpen definiálhatnánk a mozgás lefolyásához tartozó, meghatározott eloszlást. Az ütközési folyamatok esetében azonban ez nem ésszerű kérdésfeltevés. E folyamatok esetében minden mozgáshoz az ütközés előtt és után egyenesvonalú aszimptota tartozik. A részecske tehát az ütközés előtt és után (az ütközés tulaj-
képpen tartamához képest) igen hosszú időn át gyakorlatilag szabad állapotban tartózkodik. Így tehát — összhangban az előttünk álló kísérleti problémával — a következő felfogásra jutunk: Az aszimptotikus mozgásra az ütközés előtt legyen ismert a $|c(k)|^2$ eloszlásfüggvény; kiszámíthatjuk-e ebből az ütközés után érvényes eloszlásfüggvényt?

Itt természetesen stacionárius részecskeáramot tartunk szem előtt. Matematikailag így feladatunk a következőkben áll: a rezgést leíró stacionárius ψ teret befutó és kifutó hullámokra kell felbontanunk; ezek aszimptotikusan síkhullámok. Állítsuk elő ezek mindegyikét (4) alakú Fourier-integrál segítségével és válasszuk a befutó hullámok $c(k)$ koefficiens-függvényét tetszőlegesnek; a feladat abban áll, hogy megmutassuk, a kifutó hullámokhoz tartozó $c(k)$ együtthatók teljesen megvannak határozva. Ezek szolgáltatják az eloszlást, melyé valamely megadott részecske-keverék az ütközések eredményeképpen átalakul.

A viszonyok világos áttekintése érdekében foglalkozunk először az egydimenziós esettel.

3. §. *A sajátfüggvények aszimptotikus viselkedése a folytonos spektrumban egy szabadsági fok esetén.* A Schrödinger-féle differenciálegyenlet:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}(W - U(x))\psi = 0; \quad (1)$$

itt $U(x)$ a potenciális energia. Rövidítésként legyen

$$\frac{8\pi^2\mu}{h^2} W = k^2, \quad \frac{8\pi^2\mu}{h^2} U(x) = V(x); \quad (2)$$

akkor

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = V\psi. \quad (3)$$

Vizsgáljuk meg a megoldás aszimptotikus viselkedését a végtelenben. Az egyszerűség érdekében feltesszük, hogy $V(x)$ a végtelenben x^{-2} -nél gyorsabban tűnik el, azaz:

$$|V(x)| < \frac{K}{x^2}, \quad (4)$$

ahol K valamely pozitív szám [7].

A $\psi(x)$ függvényt iterációs eljárással határozzuk meg; legyen

$$u_0(x) = e^{ikx}, \quad (5)$$

továbbá $u_1(x), u_2(x), \dots$ legyenek a szukcesszív

$$\frac{d^2u_n}{dx^2} + k^2u_n = Vu_{n-1}$$

közelítő egyenleteknek azon megoldásai, amelyek $x \rightarrow +\infty$ mellett eltűnnek.

Ekkor

$$u_n(x) = \frac{1}{k} \int_x^\infty u_{n-1}(\xi) V(\xi) \sin k(\xi - x) d\xi,$$

amint arról közvetlenül meggyőződhetünk. Kapjuk:

$$|u_n(x)| \leq \frac{1}{k} \int_x^\infty |u_{n-1}(\xi)| \cdot |V(\xi)| d\xi.$$

Most megmutatjuk, hogy

$$|u_n(x)| \leq \frac{1}{n!} \left(\frac{K}{kx} \right)^n.$$

Ez igaz, ha $n=0$, minthogy (5)-ből $|u_0(x)| \leq 1$ következik. Tegyük fel, hogy az $n-1$ indexre fennáll:

$$|u_{n-1}(\xi)| \leq \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{K}{k\xi} \right)^{n-1};$$

ekkor kapjuk:

$$|u_n(x)| \leq \frac{1}{k} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{K}{k} \right)^{n-1} K \int_x^\infty \xi^{-n+1} \xi^{-2} d\xi = \frac{1}{n!} \left(\frac{K}{kx} \right)^n,$$

amint állítottuk.

Következésképpen a

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(x) \quad (6)$$

sor bármely véges közben egyenletesen konvergál; azt tetszőleges sokszor tagonként differenciálhatjuk, így az, mint könnyen látható, differenciálegyenletünk keresett megoldása.

Minthogy valamennyi u_1, u_2, \dots az $x \rightarrow +\infty$ esetben eltűnik, a ψ függvény a végtelenben aszimptotikusan $u_0 = e^{ikx}$ -be megy át.

Ugyanígy mutathatjuk meg, hogy van egy olyan megoldás, amely $x \rightarrow \infty$ esetén aszimptotikusan e^{-ikx} -be megy át. Minthogy az általános megoldás csak két állandót tartalmaz, aszimptotikusan a

$$\psi^+(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx} \quad (7)$$

alakúnak kell lennie. Itt válik láthatóvá a rendszer elfajulása; minden W sajátérték mellett fellép a két érték, k és $-k$, így hozzá két lineárisan független megoldás tartozik.

Pontosan ugyanúgy következik, hogy az általános megoldásnak $x \rightarrow -\infty$ esetén is ugyanolyan alakúnak kell lennie:

$$\psi^-(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (8)$$

Itt az A, B amplitúdók a és b meghatározott függvényei.

A megoldást most felbontjuk ki- és befutó hullámokra; írjuk ki ebből a célból az $e^{ikvt} \left(kv = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{h} W \right)$ időfaktort és legyen

$$\left. \begin{aligned} a &= c_e e^{i\varphi_e t}, & A &= C_a e^{i\Phi_a t}, \\ b &= c_a e^{-i\varphi_a t}, & B &= C_e e^{-i\Phi_e t}. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Ekkor

$$\left. \begin{aligned} \psi^+(x) &= c_e e^{ik(x+vt+\varphi_e)} + c_a e^{-ik(x-vt+\varphi_a)}, \\ \psi^-(x) &= C_a e^{ik(x+vt+\Phi_a)} + C_e e^{-ik(x-vt+\Phi_e)} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Az e indexszel megjelölt tagok valós része a befutó hullámokat írja le, az a -val megjelölteké a kifutó hullámokat.

Bennünket az az eset érdekel, amikor $x = +\infty$ mellett egy befutó hullám van; ekkor $C_e = 0$; továbbá önkényesen $\varphi_e = 0$ írható. Ekkor

$$\left. \begin{aligned} \psi^+(x) &= c_e e^{ik(x+vt)} + c_a e^{-ik(x-vt+\varphi_a)}, \\ \psi^-(x) &= C_a e^{ik(x+vt+\Phi_a)}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Megmutattuk, hogy az integráció révén $\psi^-(x)$ -et $\psi^+(x)$ meghatározza, azaz: A, B meghatározott függvényei a -nak és b -nek. Esetünkben $C_e = 0, B = 0$; a nyert két egyenlet tehát ilyen alakú:

$$\left. \begin{aligned} A &= A(a, b), \\ 0 &= B(a, b). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

A második egyenletből a b az a segítségével kifejezhető, majd az elsőből megkaphatjuk A -t a -val kifejezve. Ez azonban azt jelenti, hogy a visszavert hullám állandói s az áthaladó hullám állandói a beeső hullám amplitudójából kiszámíthatók.

Meg lehet most már mutatni, hogy a három hullám intenzitása között összefüggés áll fenn. Ezt a legegyszerűbben az energiatétel segítségével kaphatjuk meg.

4. §. *Az energia megmaradásának tétele.* E tétel levezetése céljából nyúlunk vissza a Schrödinger-féle differenciálegyenlet azon alakjáért, amely még nem veszi tekintetbe a tisztán periodikus rezgésre vonatkozó feltevést; egy

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

alakú hullámegyenletből indulunk ki tehát, ahol v a hullámsebesség. A Schrödinger-egyenletre úgy jutunk, ha *de Broglie* nyomán [8] a

$$\begin{aligned} hv &= W = \frac{\mu}{2} u^2 + U, \\ v &= \lambda v, \quad \frac{h}{\lambda} = p = \mu u \end{aligned}$$

feltevéssel élünk; ekkor

$$\begin{aligned} \frac{1}{v^2} &= \frac{h^2}{\lambda^2} \frac{1}{h^2 v^2} = \frac{\mu^2 u^2}{W^2} = \frac{\frac{\mu}{2} u^2 \cdot 2\mu}{W^2}, \\ \frac{1}{v^2} &= \frac{2\mu}{W^2} (W - U). \end{aligned} \quad (2)$$

Ha olyan megoldásokat keresünk, amelyek időfüggését az $e^{2\pi i vt} = e^{\frac{2\pi i}{h} W t}$ faktor adja meg, úgy kapjuk:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U) \psi = 0.$$

Most azonban az általános (1) alakból indulunk ki, s az egyenletet megszorozzuk $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ -vel.

Fennáll

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2.$$

Feltéve, hogy v csak x -től függ, kapjuk:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2v^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 \right) = 0. \quad (3)$$

A térre integrálva kapjuk:

$$\left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 \right\} dx = 0. \quad (4)$$

Itt — mint azt az 1. §-ban megmutattuk — a térfogati integrált a térben jelen levő összenergiaként kell értelmeznünk. Ennek kifejezése azonban nem érdekel bennünket, minthogy számunkra a be- és kiáramló energia a fontos, melyet a határon fellépő tagok adnak meg. Időben periodikus folyamat esetén a második tag időátlagos eltűnik, s a 3. § (7), (8) alatt bevezetett jelölés felhasználásával nyerjük a

$$\overline{\frac{\partial \psi^-}{\partial x} \frac{\partial \psi^-}{\partial t}} = \overline{\frac{\partial \psi^+}{\partial x} \frac{\partial \psi^+}{\partial t}} \quad (5)$$

összefüggéseket. Ez az egyenlet azt mondja, hogy a beáramló energia egyenlő a kiáramlóval. Behelyettesítve ide a 3. § (10) alatt felírt kifejezések valós részét, kapjuk:

$$C_a^2 - C_e^2 = c_e^2 - c_a^2, \quad (6)$$

vagy a $C_e = 0$ esetben [vö. (11), 3. §]:

$$c_e^2 = c_a^2 + C_a^2. \quad (7)$$

Ez azt jelenti, hogy minden egyes, adott k -hoz tartozó elemi hullám esetében a beeső intenzitás ketté oszolva adja meg a jobbra és balra szóródott két hullám intenzitását; vagy a korpuszkuláris elmélet nyelvén: ha adott energiájú részecske az atomnak ütközik, úgy vagy visszaverődik, vagy tovább halad; e két esemény valószínűségének összege 1.

Az energia megmaradásának tételéből következik tehát a részecskeszám megmaradása. Ennek oka a rendszer elfajulásában rejlik; minden egyes sajátértékhez több mozgás tartozik és ezek között nyerünk összefüggést.

5. §. *Általánosítás három szabadsági fokra. A tehetetlenségi mozgás.* Vegyük szemügyre egy a térben az $U(x, y, z)$ potenciális energia hatása alatt mozgó részecskét. Ekkor a 4. § (1) differenciálegyenlete mintájára írható:

$$\Delta \psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0, \quad (1)$$

ahol v -t a klasszikus mechanika közelítésében ismét 4. § (2) adja meg. A megmaradási tétel most

$$\operatorname{div} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \operatorname{grad} \psi \right) - \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \left\{ (\operatorname{grad} \psi)^2 + \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 \right\} = 0, \quad (2)$$

vagy integrálva a térre:

$$\int_{\infty} \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial v} d\sigma - \frac{\partial}{\partial t} \int \left\{ (\operatorname{grad} \psi)^2 + \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 \right\} dS = 0, \quad (3)$$

itt $dS = dx dy dz$, és $d\sigma$ egy a végtelen távolban fekvő zárt felület eleme, a v külső normálissal. Időben periodikus folyamatokra innen következik, hogy az első tag időátlaga eltűnik:

$$\int_{\infty} \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial v} d\sigma = 0. \quad (4)$$

Erre az esetre a

$$\Delta \psi + (k^2 - V) \psi = 0 \quad (5)$$

differenciálegyenlet érvényes, ahol

$$k^2 = \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} W, \quad V(x, y, z) = \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} U(x, y, z). \quad (6)$$

Tehetetlenségi mozgás ($V=0$) esetén a differenciálegyenlet:

$$\Delta \psi + k^2 \psi = 0; \quad (7)$$

a megoldás:

$$\psi = e^{i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{f})} \quad (8)$$

itt \mathbf{r} az x, y, z komponensekkel rendelkező vektor; \mathbf{f} a

$$|\mathbf{f}|^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 \quad (9)$$

relációnak tesz eleget, s egy faktortól eltekintve az impulzusvektorral egyezik meg:

$$\mathbf{p} = \frac{h}{2\pi} \mathbf{f}. \quad (10)$$

A de Broglie-féle hullámhosszat $\frac{h}{\lambda} = p = |\mathbf{p}| = \frac{h}{2\pi} k$ adja meg. A (8) megoldás a középértékképzéssel [lásd 2. § (2)] definiált értelemben normálnak tekintendő. Az x, y, z változók valamely függvényét röviden $f(\mathbf{r})$ -rel, a k_x, k_y, k_z változókat $f(\mathbf{f})$ -val stb. jelöljük. Legyen $dS = dx dy dz$.

A (7) egyenlet legáltalánosabb megoldása

$$\psi(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{s}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})} d\omega, \quad c(\mathbf{s}) = c^*(\mathbf{s}), \quad (11)$$

ahol \mathbf{s} egységvektor, $d\omega$ pedig a térszögelem. Ez tehetetlenségi mozgásokat ír le az összes lehetséges irány mentén, ugyanazon energiával; az alapulvett elvek szerint $|c(\mathbf{s})|^2$ az \mathbf{s} irányba repülő részecskék egységnyi térszögre eső száma.

Levezetjük az u_0 függvény egy aszimptotikus előállítását, mely világosan megmutatja, miként viselkedik u_0 a végtelenben. Bár az eredmény igen egyszerűen megkapható, azt itt egy általános módszerrel kívánjuk levezetni, mely a később tárgyalásra kerülő bonyolultabb esetekre is alkalmazható. Gondoljuk el, hogy az

$$\left. \begin{aligned} x &= a_{11}X + a_{12}Y + a_{13}Z, & X &= a_{11}x + a_{21}y + a_{31}z, \\ y &= a_{21}X + a_{22}Y + a_{23}Z, & Y &= a_{12}x + a_{22}y + a_{32}z, \\ z &= a_{31}X + a_{32}Y + a_{33}Z, & Z &= a_{13}x + a_{23}y + a_{33}z \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

ortogonális transzformáció segítségével új X, Y, Z derékszögű koordinátarendszert vezetünk be. Egyszersmind az s egységvektor helyett ugyanezen ortogonális transzformáció segítségével bevezetjük az új \mathfrak{S} egységvektort; ekkor a $d\omega$ térszögelem a $d\Omega$ új térszögelembe megy át, és kapjuk:

$$r\mathfrak{s} = R\mathfrak{S}. \quad (13)$$

Válasszuk az új koordinátarendszert oly módon, hogy

$$X=0, \quad Y=0 \quad (14)$$

legyen; ekkor

$$Z = r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (15)$$

A (11) integrál ekkor így írható:

$$\begin{aligned} u_0(x, y, z) &= u_0(a_{13}Z, a_{23}Z, a_{33}Z) = \\ &= \int d\Omega c(a_{11}\mathfrak{S}_x + a_{12}\mathfrak{S}_y + a_{13}\mathfrak{S}_z, \dots) e^{ikZ\mathfrak{S}_z}. \end{aligned}$$

Vezessük be \mathfrak{S} polárkoordinátáit:

$$\mathfrak{S}_x = \sin \vartheta \cos \varphi, \quad \mathfrak{S}_y = \sin \vartheta \sin \varphi, \quad \mathfrak{S}_z = \cos \vartheta, \quad (16)$$

és legyen $\cos \vartheta = \mu$; ekkor

$$u_0 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} d\mu c(\sqrt{1-\mu^2}(a_{11}\cos\varphi + a_{12}\sin\varphi) + \mu a_{13}, \dots) e^{ikZ\mu}.$$

Parciális integrálással innen következik:

$$\begin{aligned} u_0 &= \frac{1}{ikZ} \int_0^{2\pi} d\varphi \{c(a_{13}, a_{23}, a_{33})e^{ikZ} - c(-a_{13}, -a_{23}, -a_{33})e^{-ikZ}\} - \\ &- \frac{1}{ikZ} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{d}{d\mu} c(\sqrt{1-\mu^2}(a_{11}\cos\varphi + a_{12}\sin\varphi) + \mu a_{13}, \dots) e^{ikZ\mu} d\mu. \end{aligned}$$

Ezen eljárás újból alkalmazva látjuk, hogy a második tag Z^{-2} módjára eltűnik. Beírva ide a $Z=r$, $a_{13}=\frac{x}{Z}=\frac{x}{r}$, ... értékeket, nyerjük az

$$u_0^\infty(x, y, z) = \frac{2\pi}{ikr} \left\{ c \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right) e^{ikr} - c \left(-\frac{x}{r}, -\frac{y}{r}, -\frac{z}{r} \right) e^{-ikr} \right\}, \quad (17)$$

vagy másként, $c = |c|e^{ik\gamma}$ -t írva, az

$$u_0^\infty(x, y, z) = \frac{4\pi}{k} \left| c \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right) \right| \frac{\sin k \left(r + \gamma \left[\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right] \right)}{r} \quad (18)$$

aszimptotikus kifejezést. Ez azt jelenti, hogy u_0 aszimptotikusan gömbhullámként viselkedik, az iránytól függő amplitudóval és fázissal; az intenzitás mint az $s = \frac{\mathbf{r}}{r}$ irány függvénye meghatározza az s -et mint tengelyt körülvevő $d\omega$ térszögelembe érkező részecskék gyakoriságát:

$$\Phi_0 d\omega = |c(s)|^2 d\omega. \quad (19)$$

6. §. *Rugalmas ütközések.* Most rátérünk az általános

$$\Delta\psi + (k^2 - V)\psi = 0 \quad (1)$$

egyenlet [vö. (5), 5. §] integrálására; ez fizikailag annak felel meg, hogy az elektron nem gerjeszthető atomnak ütközik.

Mint a 3. §-ban, ψ -t iterációs eljárással nyerjük, melyhez kiindulásként az imént bevezetett u_0 függvény [5. § (11)] szolgál. Ezek után rendre meghatározzuk az u_1, u_2, \dots függvényeket a

$$\Delta u_n + k^2 u_n = V u_{n-1} = F_{n-1} \quad (2)$$

iterációs egyenletekből. A Green-tétel a megoldást — mely az e^{ikr} időfaktorral ellátva kifutó hullámoknak felel meg — az

$$u_n(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int F_{n-1}(\mathbf{r}') \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dS' \quad (3)$$

alakban szolgáltatja, ahol \mathbf{r}' az x', y', z' komponensekkel rendelkező vektort jelöli, továbbá $dS' = dx' dy' dz'$. Az eljárás konvergenciáját igazolhatjuk azon feltevés alapján, hogy V úgy tart zérushoz, mint r^{-2} [9]; ezt azonban nem részletezzük, hanem feltesszük, hogy a

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(\mathbf{r})$$

sor előállítja a megoldást.

Vizsgáljuk meg $u_n(\mathbf{r})$ aszimptotikus viselkedését. Részletesen írható:

$$u_n(x, y, z) = -\frac{1}{4\pi} \iiint F_{n-1}(x' y' z') \frac{e^{-ik\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}}}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} dx' dy' dz'.$$

Ismét végrehajtjuk a koordinátarendszeren az 5. §-ban megadott elforgatást, és az integrációs változókat ugyanazon elforgatásnak vetjük alá. Ekkor

$$u_n(x, y, z) = u_n(a_{13} Z, a_{23} Z, a_{33} Z) = \quad (4)$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \iiint F'_{n-1}(X' Y' Z') \frac{e^{-ik\sqrt{X'^2+Y'^2+(Z-Z')^2}}}{\sqrt{X'^2+Y'^2+(Z-Z')^2}} dX' dY' dZ';$$

itt

$$F'_{n-1}(X', Y', Z') = F_{n-1}(a_{11}X' + a_{12}Y' + a_{13}Z', \dots). \quad (5)$$

Vezessünk be polárkoordinátákat:

$$X' = \varrho \sin \vartheta \cos \varphi, \quad Y' = \varrho \sin \vartheta \sin \varphi, \quad Z' = \varrho \cos \vartheta.$$

Ekkor

$$u_n = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \varrho^2 d\varrho \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta F'_{n-1}(\varrho \sin \vartheta \cos \varphi, \dots) \cdot \frac{e^{-ik\sqrt{\varrho^2+Z^2-2\varrho Z \cos \vartheta}}}{\sqrt{\varrho^2+Z^2-2\varrho Z \cos \vartheta}}.$$

Végül ϑ helyett bevezetjük a μ integrációs változót a

$$\sqrt{\varrho^2+Z^2-2\varrho Z \cos \vartheta} = Z\mu,$$

$$\sin \vartheta d\vartheta = \frac{Z}{\varrho} \mu d\mu;$$

képletekkel; az integráció határai ekkor

$$\vartheta = 0: \mu = \left| \frac{\varrho}{Z} - 1 \right|; \quad \vartheta = \pi: \mu = \frac{\varrho}{Z} + 1;$$

$\cos \vartheta$ -t és $\sin \vartheta$ -t bizonyos $c(\varrho, Z, \mu)$, $s(\varrho, Z, \mu)$ függvények állítják elő, melyek az alsó határon a $c=1, s=0$, felső határon a $c=-1, s=0$ értékeket veszik fel. Ily módon kapjuk:

$$u_n = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \varrho d\varrho \int_{\left| \frac{\varrho}{Z} - 1 \right|}^{\frac{\varrho}{Z} + 1} F'_{n-1}(\varrho s \cos \varphi, \varrho s \sin \varphi, \varrho c) e^{-ik\mu Z} d\mu.$$

Innen parciális integrálással nyerjük, mint az 5. §-ban, az

$$u_n^\infty = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \varrho d\varrho \frac{1}{ikZ} \{F'_{n-1}(0, 0, \varrho) e^{-ik(Z+\varrho)} - F'_{n-1}(0, 0, -\varrho) e^{-ik|Z-\varrho|}\}$$

aszimptotikus előállítás. Itt (5) szerint

$$F'_{n-1}(0, 0, \varrho) = F_{n-1}(a_{13} \varrho, a_{23} \varrho, a_{33} \varrho) = F_{n-1}\left(\frac{\varrho x}{r}, \frac{\varrho y}{r}, \frac{\varrho z}{r}\right),$$

$$F'_{n-1}(0, 0, -\varrho) = F_{n-1}(-a_{13} \varrho, -a_{23} \varrho, -a_{33} \varrho) = F_{n-1}\left(-\frac{\varrho x}{r}, -\frac{\varrho y}{r}, -\frac{\varrho z}{r}\right).$$

Így tehát

$$u_n^\infty = \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \int_0^\infty \varrho d\varrho F_{n-1}\left(\frac{\varrho x}{r}, \frac{\varrho y}{r}, \frac{\varrho z}{r}\right) e^{-ik\varrho} - \\ - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \int_0^r \varrho d\varrho F_{n-1}\left(-\frac{\varrho x}{r}, \dots\right) e^{ik\varrho} - \frac{e^{ikr}}{2ikr} \int_r^\infty \varrho d\varrho F_{n-1}\left(-\frac{\varrho x}{r}, \dots\right) e^{-ik\varrho}.$$

Itt a második integrál $r \rightarrow \infty$ esetén eltűnik; feltettük ugyanis, hogy $|V| \leq ar^{-2}$, így $|u_0| \leq br^{-1}$ folytán

$$|F_{n-1}| \leq \frac{A}{r^3},$$

tehát

$$\left| \int_r^\infty \varrho d\varrho F_{n-1}\left(-\frac{\varrho x}{r}, \dots\right) e^{-ik\varrho} \right| \leq A \int_r^\infty \frac{d\varrho}{\varrho^2} = \frac{A}{r}.$$

Végeredményként kapjuk:

$$u_n^\infty = \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \int_0^\infty \varrho d\varrho \left\{ F_{n-1}\left(\frac{\varrho x}{r}, \dots\right) e^{-ik\varrho} - F_{n-1}\left(-\frac{\varrho x}{r}, \dots\right) e^{-ik\varrho} \right\}. \quad (6)$$

Ennek azonban még áttekinthetőbb alakot adhatunk. Ebből a célból bevezetjük az F_{n-1} függvény Fourier-koefficiensét:

$$f_{n-1}(\mathfrak{f}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint F_{n-1}(\mathfrak{r}) e^{-i\mathfrak{r}\mathfrak{f}} dS = \\ = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty r^2 dr \iint d\omega F_{n-1}(r\mathfrak{s}) e^{-ir(\mathfrak{f}\mathfrak{s})}. \quad (7)$$

A már kétszer alkalmazott eljárással meghatározzuk az aszimptotikus értéket; kapjuk:

$$f_{n-1}^\infty(k_x, k_y, k_z) = \\ = \frac{1}{4\pi^2 ik} \int_0^\infty r dr \left\{ F_{n-1}\left(\frac{rk_x}{k}, \dots\right) e^{ikr} - F_{n-1}\left(-\frac{rk_x}{k}, \dots\right) e^{-ikr} \right\}.$$

Eszerint

$$f_{n-1}^{\infty} \left(-k \frac{x}{r}, -k \frac{y}{r}, -k \frac{z}{r} \right) = \frac{1}{4\pi^2 ik} \int_0^{\infty} \varrho d\varrho \left\{ F_{n-1} \left(\frac{\varrho x}{r}, \dots \right) e^{-i\varrho k} - F_{n-1} \left(-\frac{\varrho x}{r}, \dots \right) e^{i\varrho k} \right\}. \quad (8)$$

Ezt (6)-ba helyettesítve végeredményként kapjuk:

$$u_n^{\infty}(x, y, z) = 2\pi^2 f_{n-1}^{\infty} \left(-k \frac{x}{r}, -k \frac{y}{r}, -k \frac{z}{r} \right) \frac{e^{-ikr}}{r}. \quad (9)$$

Összehasonlítva ezt az 5. § (11) és (18) képleteivel látjuk: a végtelenben elhelyezkedő megfigyelő a szórt sugárzást síkhullámként észleli, melynek

$$\frac{k}{2\pi} 2\pi^2 |f_{n-1}^{\infty}(-k\mathfrak{s})| = k\pi |f_{n-1}^{\infty}(-k\mathfrak{s})|$$

amplitúdója az \mathfrak{s} iránytól függ; annak valószínűsége, hogy valamely elektron az \mathfrak{s} közepes iránnyal jellemzett $d\omega$ térszögelembe térül el, eszerint

$$\Phi d\omega = \pi^2 k^2 \left| \sum_{n=0}^{\infty} f_n^{\infty}(-k\mathfrak{s}) \right|^2 d\omega. \quad (10)$$

Az egész megoldás aszimptotikusan a

$$\psi^{\infty} = u_0^{\infty} + \sum_{n=1}^{\infty} u_n^{\infty} = \frac{2\pi}{k} \left\{ c(\mathfrak{s}) |e^{ik(r+\delta)} + k\pi \sum_{n=1}^{\infty} f_n^{\infty}(-k\mathfrak{s}) e^{-ikr} \right\}$$

alakú. Ha ezt a kifejezést kiegészítjük az e^{ikvt} időtényezővel, úgy az 5. § (4) képlete könnyűszerrel szolgáltatja a „részecskeszám megmaradását”.

Első közelítésben kapjuk:

$$\Phi d\omega = \pi^2 k^2 |f_0^{\infty}(-k\mathfrak{s})|^2 d\omega; \quad (11)$$

f_0 -t kiszámíthatjuk az

$$f_0(\mathfrak{f}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int F_0(\mathbf{r}) e^{-i(\mathfrak{f}\mathbf{r})} dS \quad (12)$$

szigorú képletből, vagy azonnal használhatjuk (lásd [8]) az

$$f_0^{\infty}(-k\mathfrak{s}) = \frac{1}{4\pi^2 ik} \int_0^{\infty} \varrho d\varrho \{ F_0(\varrho\mathfrak{s}) e^{i\varrho k} - F_0(-\varrho\mathfrak{s}) e^{-i\varrho k} \} \quad (13)$$

aszimptotikus kifejezést.

7. §. *Rugalmatlan elektronütközések.* Jellemezze az atomot (vagy a molekulát; mi mindig „atomot” mondunk) a $H^a(p, q)$ Hamilton-függvény [10]; tegyük fel,

hogy a Schrödinger-egyenletet e rendszerre megoldottuk; ismerjük tehát a W_n^a sajátértékeket és a $\psi_n^a(q)$ sajátfüggvényeket, melyek a

$$[H^a - W_n^a, \psi_n^a] = 0 \quad (1)$$

egyenleteket azonosan teljesítik.

Ütközzék ennek az atomnak egy elektron; a szabad elektron Hamilton-függvénye

$$H^e = \frac{1}{2\mu} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2);$$

a W^e sajátértékek: valamennyi pozitív szám, a sajátfüggvények pedig

$$e^{\pm k(rs)}, \quad k^2 = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} W^e; \quad (2)$$

a beeső hullámoknak megfelelő általános megoldás:

$$\psi_k^e = \int_{rs>0} c^0(s) e^{ik(rs)} d\omega; \quad (3)$$

ez a

$$[H^e - W^e, \psi_k^e] = 0 \quad \text{vagy} \quad \Delta\psi_k^e + k^2\psi_k^e = 0 \quad (4)$$

differenciálegyenletnek tesz eleget. Az atom és az elektron között uralkodják az

$$U(q; x, y, z) \quad (5)$$

potenciális energia.

A két részecske kölcsönhatását a

$$H = H^0 + \lambda H^{(1)}$$

Hamilton-függvény írja le, ahol

$$\left. \begin{aligned} H^0 &= H^a + H^e, \\ \lambda H^{(1)} &= U. \end{aligned} \right\}$$

A megoldás a perturbálatlan rendszer esetében

$$W_{nk}^0 = W_n^a + W^e, \quad \psi_{nk}^0 = \psi_n^a \psi_k^e.$$

A perturbált rendszer

$$[H - W, \psi] = 0$$

Schrödinger-féle differenciálegyenletét a

$$\psi = \psi^0 + \lambda\psi^{(1)} + \dots$$

feltevés alapján kívánjuk megoldani. Így a

$$\begin{aligned} [H^0 - W_{nk}^0, \psi_{nk}^{(1)}] &= -U\psi_{nk}^0, \\ [H^0 - W_{nk}^0, \psi_{nk}^{(2)}] &= -U\psi_{nk}^{(1)}, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

közelítő egyenleteket nyerjük. Írjuk részletesen:

$$[H^a, \psi_{nk}^{(1)}] + [H^e, \psi_{nk}^{(1)}] - W_{nk}^0 \psi_{nk}^{(1)} = -U \psi_{nk}^0,$$

vagy

$$[H^a, \psi_{nk}^{(1)}] - \frac{h^2}{8\pi^2\mu} \Delta \psi_{nk}^{(1)} - W_{nk}^{(0)} \psi_{nk}^{(1)} = -U \psi_{nk}^0.$$

Ennek az egyenletnek a megoldását a

$$\psi_{nk}^{(1)} = \sum_m u_{nm}^{(1)}(\mathbf{r}) \psi_m^a$$

próbakifejezés segítségével kíséreljük meg; a sorfejtés itt láthatóan egyedül a perturbálatlan atom sajátfüggvényei szerint halad, melyek együtthatói még határozatlan függvényei az elektron helyzetvektorának.

Mármost (1) szerint

$$[H^a, \psi_{nk}^{(1)}] = \sum_m u_{nm}^{(1)}(\mathbf{r}) [H^a, \psi_m^a] = \sum_m u_{nm}^{(1)}(\mathbf{r}) W_m^a \psi_m^a.$$

A jobb oldalon álló adott függvényt fejtsük ki ugyanilyen módon:

$$U \psi_{nk}^0 = \psi_k^e U \psi_n^a = \psi_k^e \sum_m U_{nm} \psi_m^a;$$

az együtthatók a potenciális energiához rendelt mátrixot képezik. E kifejezéseket a differenciálegyenletbe helyettesítve kapjuk:

$$\sum_m \psi_m^a \left\{ u_{nm}^{(1)}(\mathbf{r}) W_m^a - \frac{h^2}{8\pi^2\mu} \Delta u_{nm}^{(1)} - u_{nm}^{(1)} (W_n^a + W^e) \right\} = - \sum_m \psi_m^a U_{nm} \psi_k^e.$$

Itt ψ_m^a együtthatóit a két oldalon egyenlővé téve differenciálegyenletet nyerünk $u_{nm}^{(s)}(\mathbf{r})$ számára; szorozzuk meg ezt $-\frac{8\pi^2\mu}{h^2}$ -tel és vezessük be a

$$V = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} U, \quad V_{nm} = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} U_{nm}, \quad (6)$$

$$k_{nm}^2 = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (W_m^a - W_m^a + W^e) = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (h\nu_{nm}^a + W^e) \quad (7)$$

rövidítéseket; ily módon kapjuk:

$$\Delta u_{nm}^{(1)} + k_{nm}^2 u_{nm}^{(1)} = V_{nm} \psi_k^e. \quad (8)$$

Ezzel a problémát visszavezettük a rugalmatlan szórás korábban tárgyalt esetére; a további közelítések ugyanis szintén ilyen hullámegyenletre vezetnek. A korábbiakkal szemben azonban fennáll a következő különbség: Az atom minden egyes ($n \rightarrow m$) átmenetének megfelel egy-egy differenciálegyenlet, melynek jobb oldalát a potenciális energia megfelelő mátrixeleme határozza meg. A beeső hullámot jellemző k érték helyére minden egyes alkalommal más-más k_{nm} érték lép, melynek a

$$W_{nm}^e = \frac{h^2}{8\pi^2\mu} k_{nm}^2 = h\nu_{nm}^a + W^e \quad (9)$$

energia felel meg. Innen már következik az elektronütközések kvalitatív alaptörvénye: Az elektron energiája az ütközés után általában különbözik az ütközés előtti energiától; attól az atom valamely $h\nu_{nm}^a$ energiaszintközével tér el. Minden egyes ütközési folyamathoz tartozik egy-egy

$$\Phi_{nm} = \pi^2 k_{nm}^2 |f_0^\infty(-k_{nm} s)|^2 \quad (10)$$

valószínűségfüggvény, mely a 6. § (12) és (13) képlete segítségével határozható meg.

8. §. *Fizikai következmények.* Mindenekelőtt megmutatjuk, hogy képleteink az atomok viselkedését ütközések esetén kvalitatíve helyesen tükrözik vissza; nevezetesen számot adnak az „energiaküszöbök” létezéséről, melyeket mindenkor a kvantumelmélet alappilléreinek és a klasszikus mechanikával szemben talált legdurvább ellentmondásnak tekintettek.

Rendezzük el az atom energiaszintjeit nagyság szerint:

$$W_0^a < W_1^a < W_2^a < \dots$$

A 0 index az atom normálállapotát jelzi és fennáll

$$h\nu_{nm}^a = W_n^a - W_m^a < 0 \quad (n > m).$$

Vegyük szemügyre előbb azt az esetet, amikor az atom kezdetben normálállapotban van. Ekkor mindegyik $\nu_{m0}^a > 0$, s a 7. § (9) képletéből következik, hogy

$$W_{0m}^e = W^e - h\nu_{m0}^a.$$

Ha $W^e < h\nu_{10}^a$, úgy W_{0m}^e az $m > 0$ esetben negatívvá válnék, ami lehetetlen; így tehát $m=0$ kell, hogy legyen, és így

$$W_{00}^e = W^e.$$

„Rugalmas” reflexió következik be tehát, Φ_{00} valószínűséggel. Ha W^e -t addig növeljük, míg

$$h\nu_{10}^a < W^e < h\nu_{20}^a,$$

lesz, úgy W_{0m}^e az $m=0$ és $m=1$ esetekben pozitív; vagy rugalmas reflexió következik be Φ_{00} valószínűséggel, vagy pedig rezonanciagerjesztés Φ_{01} valószínűséggel.

Ha W^e tovább növekszik, míg

$$h\nu_{20}^a < W^e < h\nu_{30}^a,$$

teljesül, úgy három eset van:

Rugalmas reflexió Φ_{00} valószínűséggel, az első kvantumszint gerjesztése Φ_{01} valószínűséggel, a második kvantumszint gerjesztése Φ_{02} valószínűséggel; sít.

Vegyük most szemügyre azt az esetet, amikor az atom kezdetben a második kvantumállapotot ($n=1$) foglalja el; ekkor $\nu_{10}^a > 0$ és $\nu_{1m}^a < 0$, ha $m=2, 3, \dots$

Fennáll tehát

$$W_{10}^e = W^e + h\nu_{10}^a,$$

$$W_{11}^e = W^e,$$

$$W_{1m}^e = W^e - h\nu_{m1}^a, \quad m=2, 3, \dots$$

Ha $W^e < h\nu_{21}^a$, úgy W_{1m}^e negatív az $m=2, 3, \dots$ esetekben; ennek folytán vagy másodfajú ütközés következik be, miközben az elektron energiája $h\nu_{10}^a$ -val nő (a valószínűség Φ_{10}), vagy pedig rugalmas reflexió, melyhez a Φ_{11} valószínűség tartozik.

Ha

$$h\nu_{21}^a < W^e < h\nu_{31}^a,$$

úgy e folyamatokhoz járul még az $n=2$ állapot gerjesztése Φ_{12} valószínűséggel; sít.

Az általános esetben, amikor az atom kezdetben az n állapotban foglal helyet,

$$W^e < h\nu_{n+1, n}^a,$$

esetén csak másodfajú ütközések következhetnek be, mikor is az atom leesik a $0, 1, \dots, n-1$ állapotba és az elektronnak $h\nu_{n0}^a, h\nu_{n1}^a, \dots, h\nu_{n, n-1}^a$ energiát ad át rendre $\Phi_{n0}, \Phi_{n1}, \dots, \Phi_{n, n-1}$ valószínűséggel, továbbá a Φ_{nm} rugalmas reflexió. Ha W^e nagyobbá válik mint $h\nu_{n+1, n}^a$, úgy ezekhez járulnak a gerjesztések rendre a $\Phi_{n, n+1}, \Phi_{n, n+2}, \dots, \Phi_{n, m}$ valószínűségekkel, ha

$$h\nu_{n+1, n}^a < W^e < h\nu_{m+1, n}^a,$$

teljesül. A következő feladat az volna, hogy a valószínűség 7. § (10) képletét tárgyaljuk meg; itt azonban megelégszünk az alábbi nagymértékben előzetes, egyszerűsített megfontolással vitatható megfontolással. Fejtsük ki az U potenciált r^{-1} hatványai szerint; semleges atom esetében az első közelítés az

$$U(x, y, z) = \frac{e}{r^3} (\mathfrak{P} \mathbf{r}) \quad (1)$$

dipóltagot szolgáltatja, ahol $\mathfrak{P}(q)$ az atom elektromos momentuma. Rendeljük ehhez a

$$\mathfrak{P}_{nm}$$

mátrixot. Ekkor a 7. § (6) képlete szerint

$$V_{nm} = \frac{8\pi^2 \mu e}{h^2} \left(\mathfrak{P}_{nm} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right). \quad (2)$$

Ez a feltevés természetesen csak olyan elektronokra lehet helytálló, amelyek az atomtól jelentékeny távolságban haladnak el. Megfontolásainkat tehát olyan elektronokra korlátozzuk, amelyekre $r > r_0$ [11]; a 6. § (13) képlete alapján írjuk:

$$f_0^\infty(-k_{nm} \mathfrak{s}) = \frac{1}{4\pi^2 i k_{nm}} \int_{r_0}^{\infty} q dq \{ F_{nm}(q\mathfrak{s}) e^{-i q k_{nm}} - F_{nm}(-q\mathfrak{s}) e^{i q k_{nm}} \}.$$

Feltesszük, hogy a beeső elektronok párhuzamos nyalábot képeznek, mely síkhullámnak felel meg; ekkor

$$F_{nm}(q\mathfrak{s}) = V_{nm} e^{i q \mathfrak{s} z} = \frac{8\pi^2 \mu e}{h^2} (\mathfrak{P}_{nm}, \mathfrak{s}) \frac{e^{i q \mathfrak{s} z}}{q^2}.$$

Kapjuk:

$$i\pi k_{nm} f_0^\infty(-k_{nm} \mathfrak{s}) = 4\pi \frac{\mu e}{h^2} (\mathfrak{P}_{nm}, \mathfrak{s}) A, \quad (3)$$

ahol $\mathfrak{s}_z = \cos \mathfrak{g}$ mellett írható:

$$A = \int_{r_0}^{\infty} \frac{dq}{q} \cos [q (k \cos \mathfrak{g} - k_{nm})], \quad (4)$$

vagy

$$A = -C_i(r_0[k \cos \vartheta - k_{nm}]), \quad (5)$$

ahol $C_i(x)$ az integrálkoszinusz jele [12].

A valószínűségfüggvény a 7. § (10) képlete szerint

$$\Phi_{nm} = \frac{16\pi^2 \mu^2 e^2}{h^4} |\mathfrak{P}_{nm}, s|^2 A^2. \quad (6)$$

Ha végül az atom összes lehetséges helyzetére átlagolunk, úgy \mathfrak{P}_{nm} két-két komponensből képezett szorzatok középértéke eltűnik, a komponensek négyzetének középértéke pedig $\frac{1}{3} |P_{nm}|^2$ -et ad, ahol P az elektromos momentum abszolútértéke. Kapjuk tehát:

$$\Phi_{nm} = \frac{16\pi^2 \mu^2 e^2}{3h^2} |P_{nm}|^2 A^2. \quad (7)$$

Röviden megbeszéljük a valószínűségfüggvény e kifejezését.

Mindenekelőtt látható, hogy közelítésünkben a valószínűség $|P_{nm}|^2$ -tel, azaz $m \neq n$ esetén az Einstein-féle sugárzáselmélet b_{nm} együttthatóival arányos, mely utóbbiak a sugárzási térben bekövetkező abszorpció és indukált emisszió folyamatoknak felelnek meg (nem pedig a spontán emisszió $a_{nm} = \frac{8\pi h \nu_{nm}^3}{c^3} b_{nm}$ valószínűségeivel!) [13].

A rugalmas reflexió valószínűsége $|P_{nn}|^2$ -tel arányos; e mennyiségnek az optikában nincs szerepe. A P_{nm} mátrix átlós elemei általában eltűnnek [14]; kivételt az a néhány eset képez, amelyben lineáris Stark-effektus lép fel (mint a hidrogén atom esetében). Pauli közölte velem, hogy neki sikerült levezetnie a kvadrupól- és magasabb momentumok eltűnését is az alkáli atomok s termjeire, valamint a nemesgázok és az alkáli földfémek normálállapotára; ez az eredmény az atomok hatását képviselő erőter gömbszimmetriájának egzakt megfogalmazását fejezi ki. Közelítésünk nem elégséges tehát a rugalmas reflexió kiszámításához; ehhez a közelítésben egy lépéssel tovább kell menni. Ezt a későbbiekben meg kívánjuk tenni, hogy lehetőséget nyerjünk elméletünk ellenőrzésére, felhasználva azt a nagy észlelési anyagot a nem gerjesztett gázokban haladó elektronok szabad úthosszára vonatkozóan, amelyet *Lenard* és mások gyűjtöttek össze. Pontos számítások nélkül is belátható, hogy ekkor a valószínűséget P_{nm} -ban negyedrendű tagok határozzák meg. Ezek a tagok természetesen sokkal kisebbek mint $|P_{nm}|^2$. Ennek alapján megérthetjük, hogy az atomok normális hatáskeresztmetszete lassú elektronokra ($n=0$) sokkal kisebb (a „gázkinetikai” értékkel egyenlő nagyságrendű), mint gerjesztésre képes, gyors elektronokra [15].

A valószínűség függését az iránytól (5) szerint az A^2 függvény határozza meg. Ez nyilvánvalóan *elhajlási jelenségnek* felel meg.

Ezt a következtetést *de Broglie* elméletéből kb. egy évvel ezelőtt *W. Elsasser* [16] vonta le. A hullámfelfogást komolyan véve arra a következtetésre jutott, hogy lassú elektronoknak atomokon olyan eltérítést kell szenvedniök, hogy eloszlásuk az ütközés után egy kicsiny golyón elhajló fény intenzitáseloszlásának feleljen meg [17]. Kapcsolatba hozta ezzel *Ramsauernek* az elektronok szabad úthosszára vonatkozó megfigyeléseit [18], valamint *Davisson* és *Kunsman* [19] kísérleteit egy platinalemezen reflektált elektronok szögeloszlására vonatkozóan. E megfontolás helyességét

időközben igazolták Dymond [20] kísérletei, ki közvetlenül megfigyelte a reflektált elektronok interferenciamaximumainak felléptét héliumban. Képletünk összehasonlítását az észlelési anyaggal a későbbiekben fogjuk elvégezni.

9. §. *Befejező megjegyzések.* Az előző megfontolások alapján annak a véleménynek szeretnék kifejezést adni, hogy a kvantummechanika nem csak a stacionárius állapotok, hanem az átmeneti folyamatok problémájának megfogalmazását és megoldását is lehetővé teszi. Úgy látszik, hogy a Schrödinger-féle megfogalmazás képes a legkönnyebben e tényekről számot adni; ezenkívül lehetővé teszi, hogy megőrizzük megszokott felfogásunkat a térről és az időről, hol az események teljesen normálisan játszódnak le. A javasolt elmélet ezzel szemben nem felel meg az egyes események kauzális meghatározottságával szemben támasztott követelményeknek. Ezt az indeterminizmust különösen hangsúlyoztam előzetes közleményemben, miután számomra úgy látszik, hogy az a kísérletező gyakorlatával a legjobb egyezésben van. Természetesen bárki számára, aki ebbe nem kíván belenyugodni, nyitva áll a lehetőség, hogy feltegye: léteznek további, az elméletbe még be nem vezetett paraméterek, melyek az egyes eseményeket determinálják. A klasszikus mechanikában ezek a mozgás „fázisai”, pl. a részecske adott pillanathoz tartozó koordinátái. Jelenleg valószínűtlennek látszik, hogy az ezen fázisoknak megfelelő mennyiségeket természetes módon be lehessen vezetni az új elméletbe; Frenkel azonban közölte velem, hogy ez talán mégis lehetséges. Akárhogy is legyen azonban, ez a lehetőség mit sem változtat az ütközési folyamatok praktikus indeterminizmusán, hiszen a fázisokat nem tudjuk megadni; különben is így ugyanazokhoz a képletekhez kell jutnunk, mint az itt javasolt „fázismentes” elméletben.

Szeretném hinni, hogy a fénykvantumok mozgástörvényei teljesen hasonló módon tárgyalhatók [21]. Itt azonban mindjárt az alapprobléma, a szabad kisugárzás esetében nem időben periodikus, hanem lecsengő folyamattal állunk szemben; a Schrödinger-féle ψ mennyiség és az elektromágneses tér csatolt hullámegyenletei számára nem peremértékfeladattal, hanem kezdeti-érték-feladattal állunk szemben. E csatolás törvényeinek felkutatása kétségkívül a legsürgetőbb problémák egyike; úgy tudom, e kérdésen több helyütt dolgoznak [22]. Ha majd ezek a törvények meg lesznek fogalmazva, talán lehetséges lesz megalkotni az állapotok élettartamának, a sugárzási folyamatok átmeneti valószínűségeinek, a vonalszélességnek és a csillapításnak racionális elméletét.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

- [1] W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **33**, 879, 1925 és Magyar Fizikai Folyóirat **13**, 447, 1965; M. Born és P. Jordan, ZS. f. Phys. **34**, 858, 1925 és Magyar Fizikai Folyóirat **13**, 529, 1965; M. Born, W. Heisenberg és P. Jordan, ZS. f. Phys. **35**, 557, 1926 és Magyar Fizikai Folyóirat **14**, 35, 1966. Lásd még P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **109**, 642, 1925 és Magyar Fizikai Folyóirat, **14**, 171, 1966; **110**, 561, 1926.
- [2] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79**, 361, 489, 734, 1926 és Magyar Fizikai Folyóirat **2**, 551, 1954; **14**, 359, 1966. Lásd különösen a második közleményt, 499. old. Ezenkívül Naturw. **14**, 664, 1926.
- [3] Azaz úgy, ha ismerjük az állapotot minden pontban és egy pillanatban, ez az állapot eloszlását minden későbbi időre meghatározza.
- [4] E munka matematikai kidolgozásában Prof. N. Wiener (Cambridge, Mass.) volt szíves előzékenyen segíteni; szeretnék itt ezért köszönetet mondani neki, s el kell ismernem, hogy e segítség nélkül nem jutottam volna el a célhoz.
- [5] A súlyfüggvényt az egyszerűség kedvéért eggyel választom egyenlőnek.

- [6] *A. Sackur*, Ann. d. Phys. **36**, 958, 1911; **40**, 67, 1913; *H. Tetrode*, Phys. ZS. **14**, 212, 1913; Ann. d. Phys. **38**, 434, 1912.
- [7] Ezzel a feltevessel a tiszta Coulomb-teret és a dipól-teret kizártuk.
- [8] A relativitást elhanyagoljuk és a klasszikus mechanika alapján számolunk.
- [9] Ezzel az ionok esetét kizártuk; ezek esetében a közelítő eljárás kiindulópontjának nem egyenes vonalú mozgást, hanem az elektron valamely hiperbolapályáját kell választanunk. Lásd *J. R. Oppenheimer* dolgozatát, Proc. Cambridge Phil. Soc., 1926. július 26.
- [10] Röviden $p_1, p_2, \dots, p_f, q_1, q_2, \dots, q_f$ helyett p -t, q -t írunk.
- [11] A centrális ütközések kizárása azt jelenti, hogy egyelőre lemondunk egy különösen érdekes jelenségcsoport, nevezetesen az atomok lassú elektronokkal szemben mutatott áthatolhatóságának értelmezéséről (Ramsauer-effektus).
- [12] *S. E. Jahnke és F. Emde*, Funktionentafeln, Leipzig, 1909, 19. old.
- [13] *S. J. H. van Vleck*, Phys. Rev. **23**, 330, 1924; Journ. Opt. Soc. Amer. **9**, 27, 1924. *M. Born és P. Jordan*, ZS. f. Phys. **33**, 479, 1925.
- [14] A harmonikus oszcillátor esetében pl. eltűnnek, az anharmonikus oszcillátor esetében zérustól különböznek.
- [15] Az idevonatkozó irodalom megtalálható *J. Franck és P. Jordan* közelmúltban megjelent könyvében, Anregung von Quantensprüngen durch Stöße (Berlin, J. Springer, 1926).
- [16] *W. Elsasser*, Die Naturwiss. **13**, 711, 1925. Az *Elsasser* megfontolásainak alapjául szolgáló nagyságrendi összefüggés a hullámhossz

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{\sqrt{2\mu w}}$$

de Broglie-féle képletén alapszik. A 300 voltos sugarak esetében kb. $\lambda = 7 \cdot 10^{-9}$ cm, azaz atomi méretű hullámokkal van dolgunk.

- [17] *S. K. Schwarzschild*, Sitzungber. d. Kgl. Bayer. Akad. d. Wiss., 293. old. 1901; *G. Mie*, Ann. d. Phys. **25**, 377, 1908; *P. Debye*, Ann. d. Phys. **30**, 57, 1909.
- [18] *C. Ramsauer*, Ann. d. Phys. **64**, 513, 1921; **66**, 516, 1921; **72**, 345, 1923. További eredményeket illetően lásd Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften, 3. kötet (Berlin, J. Springer, 1924), *R. Minkowski és H. Sponer* cikke, 67. oldal.
- [19] *Davisson és Kunsman*, Phys. Rev. **22**, 243, 1923.
- [20] *Dymond*, Nature (Megjelenőben; e munkára vonatkozó ismereteimet annak köszönhetem, hogy betekintheztem egy *Dymond* által *J. Franck*hoz intézett levélbe.)
- [21] A nehézségek, amelyek eddig a „kísértet-tér”-nek az optikába való bevezetésével kapcsolatban felmerültek, úgy vélem, részben azzal a hallgatólágos feltevéssel függnek össze, hogy a hullám-centrumnak és az emittáló részecskének ugyanazon a helyen kell lenni. Ez már a Compton-effektus esetében is biztosan nem így van, és általánosságban alighanem sohasem teljesül.
- [22] Lásd *O. Klein* nemrég megjelent dolgozatát, ZS. f. Phys. **37**, 895, 1926.

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1966. VI. 28. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 9,45 (A/5) ív

66-6333 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS
KÖNYVTÁRA

Ára: 10,- Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,- Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Somogyi Antal: A kozmikus sugárzás kiterjedt légizáporainak részecskeszám szerinti eloszlása nagy részecskeszám esetén</i>	377
<i>Kertész László és Tóth Gábor: A bizmut-antimon rendszerről</i>	441
<i>Malicskó László: Oldatból való kristályosodáskor fellépő növekedési sebességingadozások vizsgálata</i>	447
<i>Binder Gyula és Kiss Gábor: Jelalakdiszkriminációs plastik előállítása és vizsgálata</i>	457

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>Max Born: Az ütközési folyamatok kvantummechanikája</i>	463
------------------------------------------------------------------	-----

✓ VL 307.226 (V)

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIV. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1966

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A POTENCIÁLSZÓRÁS ALAPFELADATA*

DOLINSZKY TAMÁS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A kvantummechanika megalkotásának első éveiben az érdeklődés előterében a kötött állapotok vizsgálata állott. Mivel a kvantummechanikai rendszereknek általában végezzámú kötött állapotuk van, az ily módon szerezhető információ csak korlátozott felvilágosítást nyújthat a rendszeren belül uralkodó törvényekről. Ezért tolódott át a kutatások súlypontja a szórási állapotok kísérleti vizsgálatára. Szórási kísérletek segítségével kötött állapotokkal egyáltalán nem rendelkező rendszerek elemei között ható kölcsönhatásról is nyerhetők adatok, így pl. a $p-p$, $p-\pi$ kölcsönhatásra vonatkozóan. Ha viszont van a rendszernek kötött állapota, szóratással olyan paraméterek is nyerhetők, amelyekről a rendszer diszkrét állapotainak vizsgálata nem mondhat semmit. Így pl. a hidrogénatom nívószerkezetéből nem tudunk következtetni a proton elektromágneses alakfaktorára, míg a proton-elektron szórás-kísérletekből — igen.

Az anyag viselkedését legpontosabban a kvantumtérelmélet formalizmusa keretében tudjuk ma leírni. A térelmélet értelmében az anyag legkisebb részének is végtelen nagy szabadsági foka van és ez konkrét problémákra való alkalmazása során leküzdhetetlen matematikai nehézségeket idéz elő. Szerencsére, ez a helyzet hasonló ahhoz, mint ami előáll a klasszikus mechanikában a kontinuumok tárgyalása esetében. Amint az eldobott gumilabda mozgását nagy vonásokban jó közelítéssel adja meg a merev testek mechanikája, úgy redukálódik — bizonyos feltételek mellett — a végtelen szabadsági-fokú rendszer közelítő kvantumelmélete néhány szabadsági fokra. Az a tapasztalat, hogy kölcsönható részrendszerek relatív mozgási energiájának $E \rightarrow 0$ csökkentése során a probléma egyre jobb közelítéssel tekinthető két tömegpont egy $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, s_1, s_2)$ potenciállal leírható kvantummechanikai mozgásának. Ez utóbbi viszont matematikailag ekvivalens egy $3+1$ szabadsági fokú részecskének egy fix, egyrészecske-potenciálon való nem-relativisztikus (rugalmas) szóródásával. Ez a jelenség az ún. potenciálszórás, amely aránylag egyszerűen tárgyalható. A potenciálszórás addig jelent jó közelítést a valóságos folyamat leírásában, amíg, az E bombázó energia alacsony értéke miatt, a kölcsönhatás után lehetséges részrendszerek még nem jöhetnek létre gerjesztett állapotban; ilyenkor a valóságban is csak rugalmas szórás léphet fel. A bombázó energia növelésével egyre újabb csatornák nyílnak, egyre több szabadsági fok gerjesztődik, de a potenciálszórás elmélete nagy vonásokban, közelítőleg még itt is megőrzi használatosságát. Hasonlóan ahhoz, ahogy a tömegpont vagy merev testek mechanikájának törvényei nagyjából eligazítanak a deformálható testek mozgásának leírásánál.

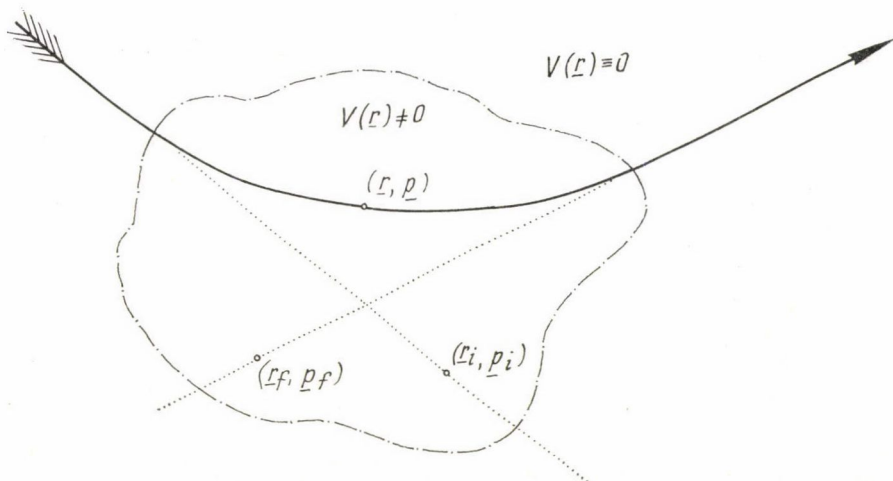
* Marx Györgynek a III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskolán tartott előadása alapján.

A szórásprobléma a klasszikus mechanikában

Tekintsünk az m -tömegű anyagi pont szóródását a $V(r)$ potenciállal leírt, a tér egy korlátos tartományában ható, erőterén (lásd 1. ábrát). A mozgást az $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t) \equiv m\dot{\mathbf{r}}(t)$ formában az

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\text{grad } V(\mathbf{r})$$

differenciálegyenlet írja le a $t=0$ időponthoz tartozó $\mathbf{r}(0) \equiv \mathbf{r}$, $\mathbf{p}(0) \equiv \mathbf{p}$ határfeltételek segítségével. Az $\mathbf{r}(t)$ görbének az időparaméter $t = \pm \infty$ -re extrapolált értékei



1. ábra. A klasszikus mozgás a véges hatótávolságú szórótér elérése előtt és elhagyása után — szabadmozgás. A kezdő- és végállapot e két szabadmozgás folytatása az egész térre.

mellett — a kölcsönhatási térrész korlátossága miatt, a feltételesen periodikus mozgások kizárása esetén — egyenes aszimptotái vannak. Az $\mathbf{r}(t)$ állapot aszimptotikája nagy $|t|$ időkre:

$$\mathbf{r}(t) \sim \mathbf{r}_i + \frac{1}{m} \mathbf{p}_i t, \quad t \rightarrow -\infty$$

$$\mathbf{r}(t) \sim \mathbf{r}_f + \frac{1}{m} \mathbf{p}_f t, \quad t \rightarrow +\infty.$$

Az adott $\mathbf{r}(t)$ fizikai állapothoz kölcsönösen egyértelműen tartozik a $t=0$ -beli (\mathbf{r}, \mathbf{p}) vektorpár. Utolsó két egyenletünkkel ugyanezen fizikai állapothoz újabb két vektorpárt, az $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ és $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$ -t rendeltük hozzá. Ezek segítségével definiálhatjuk az

$$\mathbf{r}_i(t) \equiv \mathbf{r}_i + \frac{1}{m} \mathbf{p}_i t \quad \text{minden } t\text{-re,}$$

$$\mathbf{r}_f(t) \equiv \mathbf{r}_f + \frac{1}{m} \mathbf{p}_f t \quad \text{minden } t\text{-re,}$$

szabadállapotokat. Heisenberg terminológiáját használva, az $\mathbf{r}_i(t)$ szabadállapotot az $\mathbf{r}(t)$ fizikai állapot „kezdőállapotának”, az $\mathbf{r}_f(t)$ szabadállapotot az $\mathbf{r}(t)$ fizikai állapot „végállapotának” nevezzük.

A fizikai állapotot, a kezdő állapotot és a végállapotot egyértelműen meghatározza a három mozgást a $t=0$ időpontban leíró három vektorpár: rendre az (\mathbf{r}, \mathbf{p}) , az $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$, ill. az $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$. Adott $V(\mathbf{r})$ kölcsönhatás esetén, a vektorpárok bármelyike egyértelműen meghatározza a másik kettőt. Ha történetesen $V(\mathbf{r}) \equiv 0$ volna, azaz nem lenne szórótér, úgy

$$(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) = (\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$$

lenne. A $V(\mathbf{r})$ szórópotenciál jelenlétében a 3 vektorpár különbözik egymástól. Az $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$, az (\mathbf{r}, \mathbf{p}) és az $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$ vektorpárok, illetőleg az általuk reprezentált kezdő-, fizikai, és végállapot kapcsolatát a következő sémával definiált S' , Ω_+ , Ω_- operátorokkal írhatjuk le:

$$\begin{array}{ccc} (\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) & \xrightarrow{S'} & (\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f) \\ & \searrow \Omega_+ \quad \swarrow \Omega_- & \\ & (\mathbf{r}, \mathbf{p}) & \end{array}$$

Az aszimptotátétel

A klasszikus fizikában, mint láttuk, véges hatótávolságú erőtér esetén minden (\mathbf{r}, \mathbf{p}) fizikai szórásállapothoz egyértelműen tartozik egy $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ szabad kezdő- és egy $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$ szabad végállapot. Megfordítva, minden szabad kezdőállapothoz (végállapothoz) megadhatjuk a hozzájuk tartozó fizikai szórás-állapotot.

E tételek kvantummechanikai megfelelője az ún. aszimptotátétel. Eszerint a Coulomb-potenciálnál gyorsabban eltűnő potenciál esetén az állapotegyenlet minden olyan négyzetesen-integrálható $\psi(\mathbf{r}, t)$ megoldásához, amely ortogonális a probléma kötött állapotainak \mathcal{H}_d terére, található a szabadmozgás állapotegyenletének olyan két $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ és $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$ megoldása, amelyekhez a $\psi(\mathbf{r}, t)$ állapotfüggvény nagy negatív ill. pozitív időpontokra erősen konvergál. Azaz, a

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + H\psi = 0;$$

$$H \equiv -\frac{1}{2m} \Delta + V \equiv H_0 + V;$$

$$r^{1+\varepsilon} V(\mathbf{r}) \rightarrow 0, \quad r \rightarrow \infty, \quad \varepsilon > 0;$$

$$\int \psi^2(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} < \infty;$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathcal{H}_c,$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_d \oplus \mathcal{H}_c$$

feltételekből, ahol \mathcal{H} a Hilbert-tér, \mathcal{H}_d az exponenciálisan lecsengő kötött állapotok által kifeszített altér, következik olyan $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ és $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$ függvények létezése, ame-

lyekre fennállnak az

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \varphi_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + H_0 \varphi_i = 0, \quad \frac{1}{i} \frac{\partial \varphi_f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + H_0 \varphi_f = 0,$$

$$|\psi(\mathbf{r}, t) - \varphi_i(\mathbf{r}, t)| \Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t \rightarrow -\infty,$$

és

$$|\psi(\mathbf{r}, t) - \varphi_f(\mathbf{r}, t)| \Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t \rightarrow +\infty$$

egyenletek. Az aszimptotátétel igazolására csak egy következő előadásban kerül majd sor, itt csak szemléletessé tesszük jelentését a következő észrevétellel. Míg a kötött állapotok alterének elemei exponenciális lecsengésük miatt minden időpontban a szórócentrum közelében koncentrált valószínűségi eloszlásra vezetnek, addig a kontinuum-alterben definiált szórási állapotfüggvény eloszlásának súlypontja nagy $|t|$ időpontokra minden határon túl eltávolodik, előbb-utóbb kikerül a gyorsan lecsengő erőter hatása alól és szabad hullámcsomagként folytatja mozgását.

Az aszimptotátételekben szereplő „erős-konvergencia” tipikusan Hilbert-térbeli fogalom. A függvénytér egy t paraméter szerint rendezett elemeinek sorozatának az erős (\Rightarrow) és gyenge (\rightarrow) konvergenciáját a következőképp definiáljuk:

$$\Phi_t \Rightarrow \Phi, \quad \text{ha} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \|\Phi_t - \Phi\| = 0;$$

$$\Phi_t \rightarrow \Phi, \quad \text{ha} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} (\psi, \Phi - \Phi_t) = 0,$$

ahol ψ a Hilbert-tér egy tetszőleges eleme és $\|\cdot\|$ a norma jele. Operátor-sorozatok erős és gyenge konvergenciája fogalmát a függvénysorozatok konvergenciájára vezetjük vissza:

$$U_t \Rightarrow U, \quad \text{ha} \quad U_t \psi \Rightarrow U \psi,$$

$$U_t \rightarrow U, \quad \text{ha} \quad U_t \psi \rightarrow U \psi,$$

ahol ψ a Hilbert-tér bármely fix eleme.

A Møller-féle hullámoperátorok

A $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ kezdőállapot, a $\psi(\mathbf{r}, t)$ fizikai állapot és a $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$ végállapot mindegyike egyértelműen jellemezhető $t=0$ -beli $\varphi_i(\mathbf{r})$, $\psi(\mathbf{r})$, $\varphi_f(\mathbf{r})$ alakjukkal, amelyeket

$$\varphi_i(\mathbf{r}, t) \equiv e^{-iH_0 t} \varphi_i(\mathbf{r}),$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) \equiv e^{-iH t} \psi(\mathbf{r}),$$

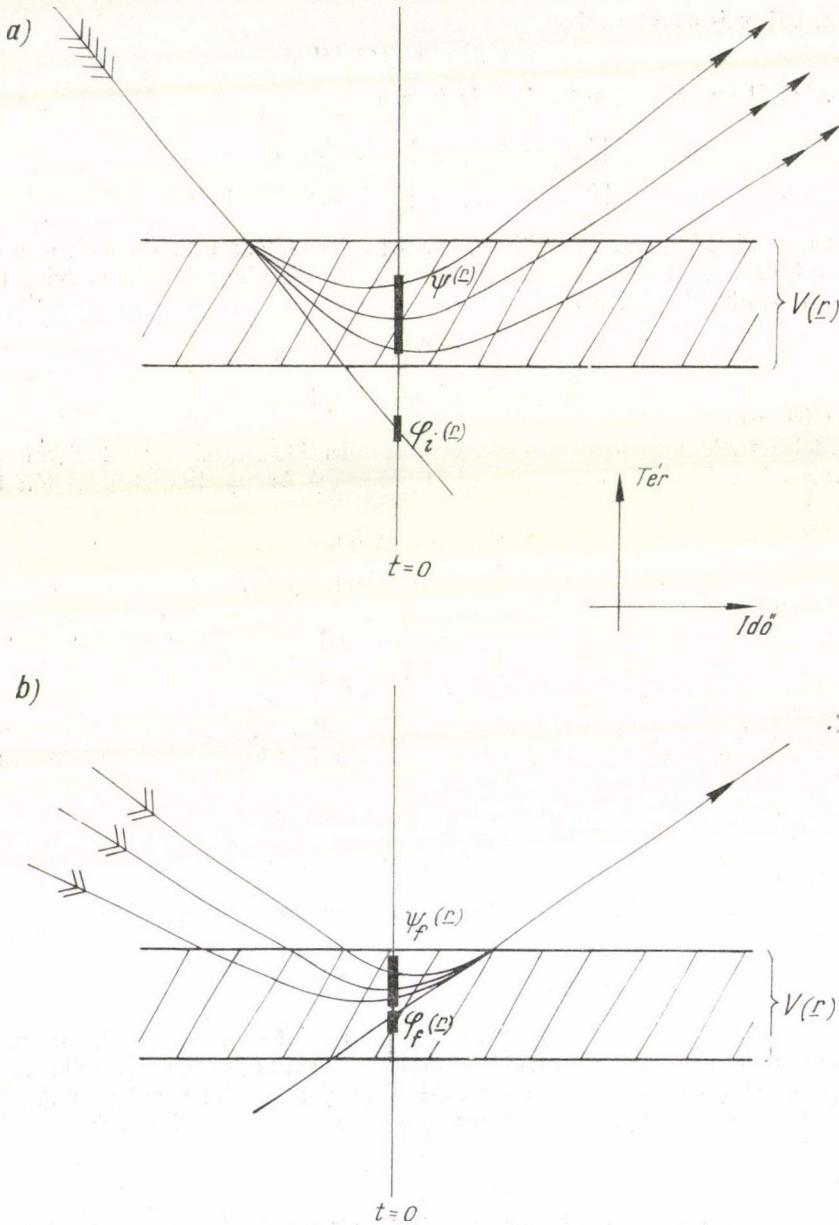
$$\varphi_f(\mathbf{r}, t) \equiv e^{-iH_0 t} \varphi_f(\mathbf{r})$$

egyenletek, mint a megfelelő állapotegyenletek megoldásai, egyértelműen definiálnak.

Az aszimptotátétel értelmében

$$|e^{-iH t} \psi(\mathbf{r}) - e^{-iH_0 t} \varphi_i(\mathbf{r})| \Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t \rightarrow -\infty;$$

$$|e^{-iH t} \psi(\mathbf{r}) - e^{-iH_0 t} \varphi_f(\mathbf{r})| \Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t \rightarrow +\infty.$$



2. ábra. A kvantummechanikai mozgás.

- a) A térben jól-koncentrált („egyszerű”) $\varphi_i(r, t)$ kezdőállapot szabadmozgás esetén a $t=0$ -kor alig szélesedik ki: $[\varphi_i(r)]$. A $V(r)$ szórótér hatására a $\varphi_i(r, t)$ kezdőállapotból kifejlődő $\psi(r, t)$ fizikai állapot $t=0$ -ra jelentősen szétfolyik: $[\psi(r)]$.
- b) A térben jól-koncentrált $\varphi_f(r, t)$ („egyszerű”) végállapot $t=0$ -kor kevésbé, a $\varphi_f(r, t)$ -t generáló $\psi(r, t)$ fizikai állapot ugyancsak $t=0$ -kor térbelileg lényegesen kiterjedt.

Az ún. változásoperátornak,

$$U(t) \equiv e^{iHt} e^{-iH_0 t}$$

bevezetésével az aszimptotátétel ekvivalens a

$$|\psi(\mathbf{r}) - U(t)\varphi_i(\mathbf{r})| \rightarrow 0, \quad \text{ha } t \rightarrow -\infty,$$

$$|\psi(\mathbf{r}) - U(t)\varphi_f(\mathbf{r})| \rightarrow 0, \quad \text{ha } t \rightarrow +\infty$$

egyenletpárral, hiszen H hermitikus, $\exp(+iHt)$ unitér; unitér operátor a skalár szorzatot és a normát s vele az erős konvergenciát invariánsan hagyja. Utolsó egyenletpárunk alternatív az

$$U(t)\varphi_i(\mathbf{r}) \Rightarrow \psi(\mathbf{r}), \quad t \rightarrow -\infty,$$

$$U(t)\varphi_f(\mathbf{r}) \Rightarrow \psi(\mathbf{r}), \quad t \rightarrow +\infty$$

alakba írható.

Értelmezzük mármost az Ω_+ , Ω_- , Møller-féle hullámoperátorokat (1945) a következő módon. Adott és összetartozó φ_i , ψ és φ_f állapotok esetén legyen (2. ábra)

$$\Omega_+ \varphi_i(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r}),$$

$$\Omega_- \varphi_f(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r}).$$

Ezek szerint

$$U(t)\varphi_i(\mathbf{r}) \Rightarrow \Omega_+ \varphi_i(\mathbf{r}),$$

$$U(t)\varphi_f(\mathbf{r}) \Rightarrow \Omega_- \varphi_f(\mathbf{r}).$$

Mivel a $\varphi_i(\mathbf{r})$ és a $\varphi_f(\mathbf{r})$ függvények sokasága külön-külön is kifeszítik a Hilbert-teret, ezért az operátorok erős konvergenciájának fent bevezetett definíciója alapján írhatjuk:

$$U(t) \Rightarrow \Omega_+, \quad \text{ha } t \rightarrow -\infty,$$

$$U(t) \Rightarrow \Omega_-, \quad \text{ha } t \rightarrow +\infty.$$

Az aszimptotátétel éppen a hullámoperátorok egzisztenciáját mondja ki.

A hullámoperátorok tulajdonságai

Az Ω_+ és Ω_- operátorok — értelmzésük szerint — a kezdő, ill. végállapotok sokaságát a belőlük kifejlődő ill. őket generáló fizikai állapotok sokaságába viszik át. Mivel a φ_i és φ_f állapotok az egész \mathcal{H} -teret, a ψ állapotok annak csak \mathcal{H}_c alterét feszítik ki, mind az Ω_+ , mind Ω_- a teljes Hilbert-teret annak kontinuum-alterére képezik le:

$$\Omega_{\pm} \mathcal{H} = \mathcal{H}_c.$$

Eszerint a hullámoperátorok nem unitérek. Mégis, Ω_+ és Ω_- rendelkeznek az unitér operátorok egyik tulajdonságával, a skalár szorzat invarianciájával, az ún. izometriával. A hullámoperátorok izometriája öröklődik az $U(t)$ unitér operátoroktól, amelyek sorozata $t \rightarrow \mp \infty$ -re erősen konvergál Ω_{\pm} -hoz. Nevezetesen, az

$$U(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t}$$

változásoperátor a H és H_0 Hamilton-operátorok hermiticitása révén unitér. Eszerint

$$(U(t)\varphi, U(t)\varphi') = (\varphi, \varphi').$$

Másrészt kimutatható, hogy a

$$\xi(t) \rightarrow \xi_0, \quad \eta(t) \rightarrow \eta_0$$

feltételek mellett általánosan fennáll skalár szorzatuk sorozatára

$$\lim_{t \rightarrow \pm \infty} (\xi(t), \eta(t)) = (\xi_0, \eta_0).$$

Ennek a segédételnek felhasználásával most már látható az izometria:

$$(\Omega_{\pm}\varphi, \Omega_{\pm}\varphi') = (\varphi, \varphi').$$

Eszerint

$$\Omega_{\pm}^{\dagger}\Omega_{\pm} = 1,$$

de az unitér operátorok másik jellemzője nem teljesül:

$$\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger} \neq 1,$$

amint azonnal kimutatjuk.

Unitaritás és izometria a függvény térben

A nem-unitér izometria fogalmának megvilágítása céljából tekintsük először az unitér operátor fogalmát.

Tekintsük az A és B nem kommutáló operátorok $|a\rangle$, ill. $|b\rangle$ sajátfüggvényeinek egy-egy teljes, ortonormált rendszerét, $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|$ ill. $\sum_i |b_i\rangle\langle b_i|$ -t. Minden elemére fennáll

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \quad B|b\rangle = b|b\rangle.$$

Tekintsük most a két, egymástól szükségképpen különböző bázisrendszert egymásba transzformáló U operátort, amelynek definíciója legyen

$$|a_i\rangle \equiv U|b_i\rangle.$$

Innen az U operátor projekciós előállítás

$$U = \sum_i |a_i\rangle\langle b_i|, \quad U^{\dagger} = \sum_i |b_i\rangle\langle a_i|.$$

Az U operátor mátrixelemei a $|b\rangle$ bázisrendszeren:

$$U_{li} \equiv \langle b_l | U | b_i \rangle = \langle b_l | a_i \rangle.$$

Innen

$$|a_i\rangle = \sum_l |b_l\rangle \langle b_l | a_i \rangle = \sum_l U_{li} |b_l\rangle.$$

Az U operátor unitér, hiszen

$$U^{\dagger}U = \sum_l \sum_j |b_l\rangle \langle a_l | a_j \rangle \langle b_j| = \sum_l |b_l\rangle \langle b_l| = 1;$$

$$UU^{\dagger} = \sum_l \sum_j |a_j\rangle \langle b_j | b_l \rangle \langle a_l| = \sum_l |a_l\rangle \langle a_l| = 1.$$

Az unitaritás felhasználásával az $|a\rangle$ bázison képzett mátrixelemre fennáll:

$$\langle a_l | U | a_i \rangle = \langle U^{-1} a_l | a_i \rangle = \langle b_l | a_i \rangle = \langle b_l | U | b_i \rangle.$$

Az U operátor mátrixelemei eszerint a két bázison megegyeznek.

Az unitaritás fogalmától különbözik az izometria fogalma: a \mathcal{H} Hilbert-tér mértéktartó leképezése egy valódi alterére. Más szóval, az izometria egy teljes bázis-rendszer mértéktartó leképezése bázisfüggvények egy nem-teljes rendszerére. Az I izometrikus operátorra fennáll:

$$(\varphi, \psi) = (I\varphi, I\psi)$$

minden φ és minden ψ mellett. Innen azonnal következik:

$$I^+ I = 1.$$

Ugyanakkor

$$II^+ \neq 1,$$

hiszen az

$$II^+ = I,$$

$$(II^+ - 1)I = 0$$

egyenletből az

$$II^+ - 1 = 0$$

összefüggés csak az $I\mathcal{H}$ altérben következik.

A geometriában véges egyenesszakaszt nem képezhetünk le mértéktartóan egy részsére; a végtelen féltengelyt azonban egy végtelen részintervallumára — igen. Ennek analógiájaképpen, a függvényterek esetében sem lehet egy végesdimenziójú Hilbert-teret mértéktartóan leképezni egy valódi alterére; végtelen dimenziójú teret már igen. Tekintsük e célból a végtelen dimenziójú függvényteret kifeszítő két bázis-rendszert, $\{ |a_n\rangle \}$ és $\{ |b_n\rangle \}$ -et. Adjuk meg az r pozitív egész számot, akkor az

$$\underbrace{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots, |b_r\rangle}_{1 - I\mathcal{H} = \mathcal{H}_1} \quad \underbrace{\begin{array}{c} |a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_n\rangle, \dots \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \quad \downarrow \\ |b_{r+1}\rangle, |b_{r+2}\rangle, \dots, |b_{r+n}\rangle, \dots \end{array}}_{I\mathcal{H} = \mathcal{H}_2}$$

sémával megadtuk a végtelen-dimenziós \mathcal{H} -térnek az $I\mathcal{H} = \mathcal{H}_2$ alterére való leképezését. A leképezést létesítő I operátor és adjungáltja az ismert módon felírható:

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} |b_{r+n}\rangle \langle a_n|, \quad I^+ = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n\rangle \langle b_{r+n}|.$$

Innen az unitaritás szempontjából döntő szorzatoperátorok:

$$I^+ I = \sum_n \sum_m |a_n\rangle \langle b_{r+n}| |b_{r+m}\rangle \langle a_m| = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n| = 1,$$

de már

$$II^+ = \sum_n \sum_m |b_{r+n}\rangle \langle a_n| |a_m\rangle \langle b_{r+m}| = \sum_n |b_{r+n}\rangle \langle b_{r+n}| = P(\mathcal{H}_2).$$

Eszerint az II^+ szorzat az $I\mathcal{H} = \mathcal{H}_2$ valódi altérbe vetítő projekciós operátort adja meg, ami nem az azonosság.

Azt a kérdést, hogy az Ω_+ , Ω_- hullámoperátorok csupán izometrikusak, vagy esetleg unitérek is, csak az aszimptotátétel megfordítása útján válaszolhatjuk meg.

Az aszimptotátétel megfordítása

Bebizonyítható, hogy a kölcsönhatásmentes H_0 operátor minden négyzetesen integrálható $\varphi(t)$ megoldásához tartozik a H operátor egy olyan $\psi_{\text{in}}(\varphi)$ és egy olyan $\psi_{\text{out}}(\varphi)$ négyzetesen integrálható megoldása, amelyekkel a $\varphi(t)$ függvény a $t \rightarrow -\infty$, ill. $t \rightarrow +\infty$ időkre az erős konvergencia értelmében aszimptotikusan megegyezik; ezek a $\psi_{\text{in}}(\varphi)$, $\psi_{\text{out}}(\varphi)$ megoldások ortogonálisak a H -probléma kötött állapotaira.

$$\begin{aligned} \langle \text{---} \text{---} \text{---} | \text{---} \text{---} \text{---} \rangle &= 0, \quad t' = T \\ \langle \text{---} \text{---} \text{---} | \text{---} \text{---} \text{---} \rangle &= 0, \quad t' = T+t \end{aligned}$$

3. ábra. A szórési hullámcsomag nagy negatív időpontokban az átfedés hiánya miatt ortogonális kötött állapotokra. Ez az ortogonalitás a \hat{a} állapotegyenlet szerkezete folytán az átfedés idejére is átöröklődik

Szemléletessé tehető a tétel második állítása, ha meggondoljuk, hogy a $\psi(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomag bármely nagy negatív, de véges időpontban, igen jó közelítéssel, ortogonális az exponenciálisan lecsengő kötött állapotokra (lásd a 3. ábrát), és ez az ortogonalitás a

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, T+t) &= e^{-iHt} \psi(\mathbf{r}, T) = \\ &= e^{-iHt} \sum_c a_c \psi_c(\mathbf{r}) = \\ &= \sum_c e^{-i\epsilon_c t} a_c \psi_c(\mathbf{r}) \quad (c = \text{index } \mathcal{H}_c\text{-ben}) \end{aligned}$$

időbeli viselkedés miatt végig megmarad. Eszerint, hiába „jön be” a hullámcsomag a szórócentrum térségébe, itt is ortogonális lesz a kötött állapotok alterére.

Korábban igazoltuk az Ω_{\pm} operátorok izometriáját. Később láttuk, hogy $II^+ = P(\mathcal{H}_2)$, azaz az izometrikus operátorok akkor és csak akkor unitérek is egyúttal, ha a Hilbert-teret önmagára képezik le. Éppen most mondtuk ki, hogy az Ω_{\pm} a Hilbert-teret a H -probléma $\mathcal{H}_c \equiv \mathcal{H} - \mathcal{H}_d$ kontinuum-alterébe viszik át. Ha a H -rendszernek van kötött állapota, akkor a \mathcal{H}_c altér valódi altér, és az Ω_+ , Ω_- nem unitérek. Ha a rendszernek nincs kötött állapota, akkor az Ω_{\pm} operátorok nemcsak izometrikusak, de unitérek is. Szélsőséges példa a végtelen sok kötött állapot kivételes jelensége: a proton-elektron kölcsönhatás. Ebben az esetben a kölcsönhatásmentes állapotok az elektron-proton relatív szabad mozgásának síkhullámai; a rendszer kötött állapotait a hidrogén-atom nívói; az elektron-proton szórási állapotfüggvény a hidrogén-atom kötött állapotaira ortogonális altérbe esik. Ilyenkor természetesen a Ω_{\pm} operátorok nem unitérek.

A hullámoperátorok „csererelációi”

Az $U(t) \Rightarrow \Omega_+$ ($t \rightarrow -\infty$) következtében minden véges időpontra azonosan igaz a következő egyenlet:

$$\begin{aligned} e^{iH\tau} \Omega_- e^{-iH_0\tau} &= e^{iH\tau} \lim_{t \rightarrow \infty} [e^{iHt} e^{-iH_0t}] e^{-iH_0\tau} = \\ &= \lim_{t+\tau \rightarrow \infty} [e^{iH(\tau+t)} e^{-iH_0(\tau+t)}] = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} U(t) = \\ &= \Omega_-, \end{aligned}$$

függetlenül τ értékétől. Ezért a τ -szerinti differenciálás a $\tau=0$ időben

$$i(H\Omega_- - \Omega_- H_0) = 0$$

eredményt ad. Hasonló reláció vezethető le Ω_+ -ra is; összefoglalva:

$$H\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} H_0,$$

azaz, a Møller-operátort a Hamilton-operátorral felcserélve, utóbbiból eltűnik a kölcsönhatás. Ez igen fontos tulajdonságuk a hullámoperátoroknak.

A szórásoперátor

Tekintsünk egy $\{\varphi_n\}$ teljes ortonormált függvényrendszert a Hilbert-térben. Kimutatjuk, hogy a $\{\psi_n\} = \Omega_+ \{\varphi_n\}$ függvényrendszer a \mathcal{H}_c -ben szintén teljes és ortonormált. Az ortonormalitás közvetlen következménye az Ω_+ izometriájának. A teljesség igazolása a kontinuum-altérbe vetítő $P(\mathcal{H}_c)$ operátornak az Ω_+ hullámoperátorral való kapcsolatából adódik a következőképpen: A $\{\varphi_n\}$ rendszer teljessége miatt a Hilbert-tér bármely ψ elemére fennáll:

$$\Omega_+^+ \psi \equiv \varphi = \sum_n a_n \varphi_n.$$

Másrészt az $\Omega_+ \Omega_+^+ = P(\mathcal{H}_c)$ segítségével

$$P(\mathcal{H}_c) \psi = \sum_n \alpha_n \Omega_{\pm} \varphi_n = \sum_n \alpha_n \psi_n;$$

azaz tetszőleges függvény kontinuum-altérbeli vetülete kifejezhető a $\{\psi_n\}$ bázison.

A φ függvényhez mint kezdőállapothoz tartozó fizikai állapotot $\psi_{\text{in}}(\varphi)$ -vel, a φ -hez mint végállapothoz tartozó fizikai állapotot $\psi_{\text{out}}(\varphi)$ -vel jelölve, előző tételünk alapján kimondhatjuk, hogy a

$$\{\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\} \text{ és a } \{\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\}$$

függvényrendszerek mindegyike ortonormált és a \mathcal{H}_c altérben teljes. A teljesség és az ortonormalitás következménye az, hogy a

$$\psi_{\text{in}}(\varphi_n) = \Omega_+ \varphi_n,$$

$$\psi_{\text{out}}(\varphi_n) = \Omega_- \varphi_n$$

definíciós egyenletek alapján a hullámoperátorok előállítása a következő:

$$\Omega_+ = \sum_n |\psi_{in}(\varphi_n)\rangle \langle \varphi_n|,$$

$$\Omega_- = \sum_n |\psi_{out}(\varphi_n)\rangle \langle \varphi_n|.$$

A fenti teljességi tételünkéből következik az is, hogy a

$$\{\psi_{in}(\varphi_n), \psi_d\} \text{ és a } \{\psi_{out}(\varphi_n), \psi_d\}$$

bázisrendszerek mindegyike most már az egész Hilbert-térben külön-külön teljes rendszer lesz.

A \mathcal{H}_c altérben értelmezett $\{\psi_{in}(\varphi_n)\}$ és $\{\psi_{out}(\varphi_n)\}$ két teljes ortonormált függvényrendszer az altéren belül értelmez egy transzformációs S operátort, amely szükségképpen unitér. Az S operátor neve *szórásoperátor*, definíciója a \mathcal{H}_c altérben:

$$\psi_{in}(\varphi_n) \equiv S\psi_{out}(\varphi_n).$$

A szórásoperátor projekciós előállítása így

$$S = \sum_n |\psi_{in}(\varphi_n)\rangle \langle \psi_{out}(\varphi_n)|$$

lesz, amelyet összehasonlíthatunk a hullámoperátorok

$$\Omega_+ = \sum_n |\psi_{in}(\varphi_n)\rangle \langle \varphi_n|$$

$$\Omega_- = \sum_n |\psi_{out}(\varphi_n)\rangle \langle \varphi_n|$$

előállításával (lásd a 4. ábrát).

A szórásoperátor fogalmát Wheeler (1937) és Heisenberg (1943) vezették be a fizikába.

Fizikai jelentése jobban kidomborodik, ha megvizsgáljuk az egyelőre definícióképpen S_{mn} -vel jelölt

$$S_{mn} \equiv \langle \psi_{out}(\varphi_m) | \psi_{in}(\varphi_n) \rangle$$

mátrixelem értelmezését. $|S_{mn}|^2$ definíciója értelmében megadja, hogy a φ_n kezdőállapotból kifejlődő $\psi_{in}(\varphi_n)$ fizikai állapotban milyen valószínűséggel van jelen a φ_m végállapotra vezető $\psi_{out}(\varphi_m)$ fizikai állapot. (Lásd a 2. ábrát). Ez azonban pontosan egyenlő annak a valószínűségével, hogy a rendszer a φ_n kezdőállapotból a kölcsönhatás eredményeképp éppen a φ_m végállapotba jut.

Mi a kapcsolata az S_{mn} mátrixelemnek a mérésekkel? A fizikában elvégzett szórás kísérleteink detektorai olyan műszerek, amelyek meghatározott egyszerű szabadállapotokra meghatározott módon szólnak meg. Segítségükkel a fizikai állapot a detektor felállításának helyén az egyszerű szabadállapotok szuperpozíciójaként analizálható. A szórócentrumtól aránylag igen nagy távolságban elhelyezett detektor a fizikai hullámcsomagot a $t=0$ -beli kölcsönhatás után aránylag igen nagy pozitív időpontban analizálja. Így mérésünk igen jó közelítéssel a végállapotot bontja fel az egyszerű szabadállapotok szuperpozíciójára. Ez azt jelenti, hogy a mérés éppen az $|S_{mn}|^2$ értékeket szolgáltatja.

Most bebizonyítjuk, hogy az S_{mn} elemekből felépített mátrix az S szórásoперátor reprezentálja akár a $\xi\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\xi$, akár a $\xi\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\xi$ bázison. Ugyanis

$$\begin{aligned} S_{mn} &\equiv \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle = \\ &= \langle S^{-1} \psi_{\text{in}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle \\ &= \langle \psi_{\text{in}}(\varphi_m) | S | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle \\ &= \psi_{\text{out}} \langle (\varphi_m) | S | \psi_{\text{out}}(\varphi_n) \rangle. \end{aligned}$$

A bizonyításnál felhasználtuk S unitaritását. Az S szórásoперátor kapcsolatát az Ω_{\pm} hullámoperátorokkal egyszerű kimutatni:

$$\begin{aligned} S_{mn} &\equiv \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle = \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \Omega_+ \varphi_n \rangle = \\ &= \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \Omega_+ \Omega_-^\dagger | \psi_{\text{out}}(\varphi_n) \rangle. \end{aligned}$$

Innen azonnal kapjuk a nevezetes összefüggést:

$$S = \Omega_+ \Omega_-^\dagger.$$

Az S és az Ω_{\pm} operátorok kapcsolatából új szemszögből láthatjuk S unitaritását a \mathcal{H}_c altérben:

$$\begin{aligned} S^+ S &= \Omega_- \Omega_+^\dagger \Omega_+ \Omega_-^\dagger = \Omega_- \Omega_-^\dagger = P(\mathcal{H}_c), \\ S S^+ &= \Omega_+ \Omega_-^\dagger \Omega_- \Omega_+^\dagger = \Omega_+ \Omega_+^\dagger = P(\mathcal{H}_c). \end{aligned}$$

Ezek szerint az S operátor értelmezési tartományán, a \mathcal{H}_c altérben belül, ahol $P(\mathcal{H}_c) = 1$, unitér.

Az S' szórásoперátor

Míg S operátor két fizikai állapotsokaság között létesített kapcsolatot, a most definiálandó S' a kezdő és végállapotok teljes rendszerét köti össze. Alakítsuk át e célból az ismert S_{mn} mátrixelemet.

$$\begin{aligned} S_{mn} &= \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle = \langle \Omega_- \varphi_m | \Omega_+ \varphi_n \rangle = \\ &= \langle \varphi_m | \Omega_-^\dagger \Omega_+ | \varphi_n \rangle \equiv \langle \varphi_m | S' | \varphi_n \rangle, \end{aligned}$$

ahol

$$S' \equiv \Omega_-^\dagger \Omega_+$$

definiálja az S' szórásoперátort. S' ezek szerint bármely kezdőállapotot átvizsgálva a belőle kifejlődő végállapotba — és így azonos a perturbációszámításos gyakorlatban elterjedt szórásoперátor-fogalommal. S' az egész Hilbert-térben értelmezve van, és itt unitér, mert

$$\begin{aligned} S'^+ S' &= \Omega_+^\dagger \Omega_- \Omega_-^\dagger \Omega_+ = \Omega_+^\dagger (1 - P(\mathcal{H}_d)) \Omega_+ = 1, \\ S' S'^+ &= \Omega_-^\dagger \Omega_+ \Omega_+^\dagger \Omega_- = \Omega_-^\dagger (1 - P(\mathcal{H}_d)) \Omega_- = 1. \end{aligned}$$

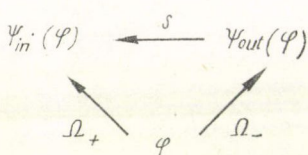
Itt felhasználtuk, hogy az Ω_{\pm} operátorok a \mathcal{H} -teret a \mathcal{H}_c altérbe viszik át; így $P(\mathcal{H}_d) \Omega_{\pm} = 0$.

Végül kimutatjuk azt a meglepő csererelációt, hogy míg az S operátor a teljes Hamilton operátorral kommutál, addig az S' operátor a kölcsönhatásmentes Hamilton-operátorral

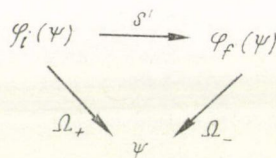
$$HS = H\Omega_+\Omega_-^+ = \Omega_+H_0\Omega_-^+ = \Omega_+(\Omega_-H_0)^+ = \Omega_+(H\Omega_-)^+ = SH,$$

$$\begin{aligned} H_0S' &= H_0\Omega_-^+\Omega_+ = (\Omega_-H_0)^+\Omega_+ = (H\Omega_-)^+\Omega_+ = \Omega_-^+H\Omega_+ = \\ &= \Omega_-^+\Omega_+H_0 = S'H_0. \end{aligned}$$

Összehasonlítva a hullámoperátorokat és a szórásoperátorokat, mondhatjuk: (lásd a 4. és 5. ábrát)



4. ábra. Az adott φ szabad állapothoz egyszer mint kezdő-, egyszer mint végállapothoz két különböző jellegű fizikai állapot, $\psi_{in}(\varphi)$ és $\psi_{out}(\varphi)$ tartozik.



5. ábra. Adott ψ fizikai állapot kapcsolata a hozzátartozó $\varphi_i(\psi)$ kezdő- és $\varphi_f(\psi)$ végállapottal.

Az Ω_+ ill. Ω_- operátorok a φ_n kezdő ill. végállapotokat viszik át a belőlük kifejlődő $\psi_{in}(\varphi_n)$, ill. őket generáló $\psi_{out}(\varphi_n)$ fizikai állapotokba. Ω_\pm az egész \mathcal{H} -térben értelmezve vannak, \mathcal{H} -ban izometrikusak és \mathcal{H}_c -ben uniterék. Az S operátor a φ_n végállapotot generáló $\psi_{out}(\varphi_n)$ fizikai állapotot viszi át az ugyanezen φ_n -ből, mint kezdőállapotból kifejlődő $\psi_{in}(\varphi_n)$ fizikai állapotba. Csak a \mathcal{H}_c altérben van értelmezve és itt unitér. Az S' operátor a φ_n kezdőállapotot viszi át a belőle kifejlődő végállapotba; az egész \mathcal{H} -térben értelmezve van és \mathcal{H} -ban unitér. S -nek egy in- és egy out-állapot között képzett mátrixeleme megegyezik S' -nek a megfelelő kezdő és végállapotok közötti mátrixelemével; modulusuk négyzete megadja, hogy a φ_n kezdőállapotból kifejlődő végállapotban milyen valószínűséggel található meg a φ_m egyszerű végállapot.

Az S' szórásoperátor előállítására idő-integrál formájában

Az alábbiakban levezetjük az S' egy integrárelőállítását, amely inkább elvi jelentősége, mint gyakorlati használhatósága miatt érdekes. E célból definiáljuk a kétváltozós $U(t, t_0)$ operátort az

$$U(t, t_0) = U^+(t)U(t_0)$$

egyenlettel, ahol $U(t)$ a már ismert egyváltozós változásoperátor:

$$U(t) \equiv e^{iHt}e^{-iH_0t}.$$

Eszerint

$$U(t, t_0) = e^{-iHt}e^{-iH_0(t-t_0)}e^{+iH_0t_0}.$$

Nyilvánvalóan fennáll a következő határfeltétel:

$$U(t_0, t_0) = 1.$$

Az új operátor számára levezethető egy integrálegyenlet. Időderiválás útján kapjuk a definíciós egyenletekből:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= e^{iH_0 t} iH_0 e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} - e^{-iH_0 t} iH e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t} = \\ &= -ie^{iH_0 t} (H - H_0) e^{-iH_0 t} U(t, t_0) = -iV(t) U(t, t_0), \end{aligned}$$

ahol bevezettük a

$$V(t) \equiv e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$$

jelölést.

A keresett integrálegyenlet a fenti kezdőfeltétel figyelembevételével

$$U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t V(t') U(t', t_0) dt'.$$

Megoldása nyilvánvalóan iterációs módszerrel közelíthető meg:

$$U(t, t_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} U_n(t, t_0),$$

ahol

$$\begin{aligned} U_{n+1}(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t V(t') U_n(t', t_0) dt'; \\ U_\infty(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t V(t_1) dt_1 + (-i)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} V(t_2) V(t_1) dt_2 dt_1 + \dots = \\ &= \sum_r (-i)^r \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{r-1}} V(t_r) \dots V(t_2) V(t_1) dt_1 dt_2 \dots dt_r = \\ &= T \exp \left[(-i) \int_{t_0}^t V(t') dt' \right]. \end{aligned}$$

Itt T a Dyson-féle időrendező operátor.

Az $U(t, t_0)$ operátor ismeretében közvetlenül nyerhetők volnának az eddig bevezetett szóráseleméleti operátorok, hiszen

$$U(0, t) = U(t), \quad U(0, -\infty) = \Omega_+,$$

$$U(t, 0) = U^+(t), \quad U(\infty, 0) = \Omega_-^+,$$

$$U(\infty, -\infty) = U^+(\infty) U(-\infty) = \Omega_-^+ \Omega_+ = S'.$$

Az $U(t, t_0)$ integrálegyenleteknek segítségével integrálegyenletet kaphatunk a hullámoperátorok számára is. A definíciós egyenlet és a cserereláció egybevetéséből:

$$U(t, -\infty) = U^+(t) \Omega_+ = e^{+iH_0 t} e^{-iHt} \Omega_+ = e^{+iH_0 t} \Omega_+ e^{-iH_0 t}.$$

Másrészt $U(t, t_0)$ egyik fenti előállítása alapján

$$U(t, -\infty) = 1 - i \int_{-\infty}^t V(t') U(t', -\infty) dt'.$$

A két utolsó egyenlet összevetéséből

$$e^{iH_0 t} \Omega_+ e^{-iH_0 t} = 1 - i \int_{-\infty}^t e^{iH_0 t'} V e^{-iH_0 t'} e^{+iH_0 t'} \Omega_+ e^{-iH_0 t'} dt'.$$

Egyszerű transzformálás után kapjuk:

$$\Omega_+ = 1 - i \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')} V \Omega_+ e^{iH_0(t-t')} dt'$$

A $t' - t \equiv \tau$ új integrációs változó bevezetése után

$$\Omega_+ = 1 - i \int_{-\infty}^0 e^{-iH_0 \tau} V \Omega_+ e^{iH_0 \tau} d\tau.$$

Ez az egyszerű szerkezetű integrálegyenlet az Ω_+ meghatározására gyakorlatilag azért nem használható fel, mert az $\exp(\pm iH_0 \tau)$ operátor szimbolikus írásmódja mögött kezelhetetlen, végtelen operátorhatványsor rejlik. Hasonlóan inkább elvi érdekességű a szórásoperátornak a fentiek alapján történő előállítása:

$$S' = U(+\infty, -\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} [e^{iH_0 t} \Omega_+ e^{-iH_0 t}].$$

A stacionér tárgyalás bevezetése

Az átmeneti valószínűségek számításához ismernünk kell az S' operátort, vagy közvetlenül annak S_{mn} mátrixelemeit. Az S' kiszámítása az előző módszerrel reménytelennek látszik. Az S_{mn} mátrixelem esetében azonban a végtelen operátorhatványsor problémája elesik, hiszen

$$S_{mn} = \langle \varphi_m | S' | \varphi_n \rangle$$

értelmében az exponenciális operátor a

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} + H_0 \varphi_n = 0$$

állapotegyenlet φ_n megoldására hat; nevezetesen

$$e^{\pm iH_0 t} \varphi_n = e^{\mp t \frac{\partial}{\partial t}} \varphi_n$$

eredménnyel. Az operátor így az integrál alól eltüntethető. Mégsem jelent megoldást ez a módszer sem, mert hullámcsomag esetén $\partial \varphi_n / \partial t$ helyfüggése bonyolult és az S_{mn} integrál nem számítható. Ha pedig φ_n -en energiasajátfüggvényt értenénk, az nem volna négyzetesen integrálható, nem tartoznék a \mathcal{H} -térhez és eddigi meggondolásaink nem volnának rá érvényesek, hiszen eddig olyan hullámcsomagokkal dolgoz-

tunk, amelyek korlátos t időpontban a tér véges tartományára korlátozódó normált állapotfüggvények voltak.

Nincs-e áthidaló megoldás? Az energiasajátfüggvények bevezetését fizikai és matematikai szempontból még egyszer kritika alá vesszük. Kísérleti berendezéseink valóban hullámcsomaggal reprezentált bombázó részeket állítanak elő, de ezek a hullámcsomagok mégis közelítőleg jól definiált impulzussal rendelkeznek, és a hullámcsomag térbeli kiterjedése sok-sok nagyságrenddel nagyobb az atom (atommag) méreteinél. Tapasztalat az is, hogy a kísérletek eredménye nem függ a hullámcsomag alakjától, ha az impulzusszórás kicsi, azaz $\Delta p \ll \langle p \rangle$ és így a Δx helyhatározatlanság elég nagy. Ezért beszélünk mindig síkhullámról, mint a relatív mozgás állapotáról szórás kísérletekben. Ezek alkalmasan „normált” állapotfüggvénye koordinátareprezentációban

$$\varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}},$$

impulzusreprezentációban

$$\varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

Az impulzussajátfüggvények nem-normálhatóak, hiszen normájuk

$$(\varphi_{\mathbf{p}}|\varphi_{\mathbf{p}'}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

és

$$\int \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{x}') d^3\mathbf{p} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

értelmében egyik változóban sem korlátos. Hasonló viselkedést mutatnak a H teljes Hamilton-operátor \mathcal{H}_c -be eső sajátfüggvényei is. Az energiasajátfüggvények sem normálhatóak, nem tekinthetők fizikai állapotfüggvényeknek és rájuk az aszimptotátétel és egyéb eredményeink nem vihetők át minden további nélkül. Az energiasajátfüggvények függvénytanai szempontból a függvényfogalom egyik általánosításának, ún. disztribúciónak tekintendők. Az eljárásunk elve a továbbiakban az lesz, hogy stacionér felfogásban, azaz energiasajátfüggvényekkel, mint disztribúciókkal számolunk a disztribúcióelmélet törvényei szerint. Fizikai értelme a képleteknek ekkor még nincs. A végső eredményt úgy kapjuk, hogy egy, a hullámcsomag felépítését jellemző $c(\mathbf{p}')$ spektrálfüggvénnyel szorzunk és energiára vagy impulzusra integrálunk; ezzel normálható függvényekre, azaz fizikai állapotfüggvényekre vonatkozó megállapításokra jutunk a

$$\varphi_n(\mathbf{x}) = \int c(\mathbf{p}') \varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{p}'$$

hullámcsomag felépítése által megszabott módon.

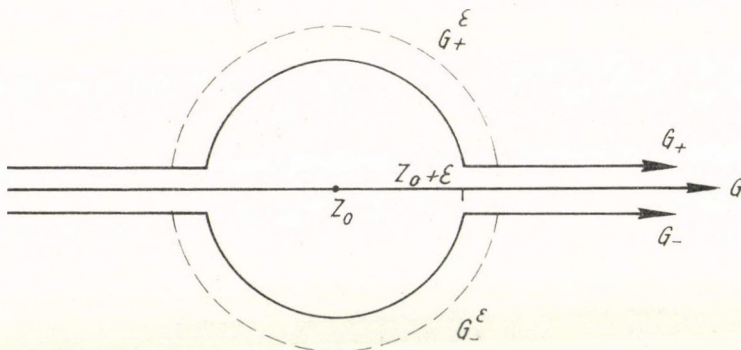
Disztribúcióelméleti segédtételek

A továbbiak folyamán több disztribúcióelméleti összefüggésre is szükségünk lesz; ezek levezetését most megadjuk.

Az első a komplex függvénytan határértéktétele; a fizikában való első alkalmazása Dirac (1947) nevéhez fűződik és szimbolikusan így írható fel:

$$\frac{1}{z \pm i\varepsilon} = \frac{P}{z} \mp i\pi\delta(z), \quad \varepsilon \rightarrow +0.$$

Itt P a főértékképzés operátora. Az operátoregyenlet értelmet egy $f(z)$ függvénnyel való szorzás és a $z = (-\infty, +\infty)$ intervallumban való integrálás útján nyer. Levezetése a Cauchy-formulán alapszik és a következő gondolatmenettel adható meg.



6. ábra. Integrációs kontúrok a disztribúciós segédtetelek levezetéséhez.

Legyen $f(z)$ analitikus függvény a $z = z_0$ pont ε -sugarú környezetében. (Lásd a 6. ábrát). A Cauchy-formula és a δ -disztribúció értelmezésének segítségével az $f(z_0)$ értéket megkaphatjuk az $f(z)$ függvény értékészletéből $z = z_0$ körül. Nevezetesen

$$\begin{aligned} f(z_0) &= \int_{\mathcal{G}} f(z) \delta(z - z_0) dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\varepsilon} \frac{f(z) dz}{z - z_0} = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \left[\int_{\mathcal{G}_-} - \int_{\mathcal{G}_+} \right] \frac{f(z) dz}{z - z_0}. \end{aligned}$$

Ismét áttérhetünk a \mathcal{G} egyenes-menti integrálásra, hiszen $f(z)$ analitikus és a nevezőben jelöljük az integrandus megváltozását.

$$\begin{aligned} f(z_0) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{G}} \left[\frac{1}{z - z_0 - i\varepsilon} - \frac{1}{z - z_0 + i\varepsilon} \right] f(z) dz = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{G}} \frac{2i\varepsilon f(z) dz}{(z - z_0)^2 + \varepsilon^2}. \end{aligned}$$

Eszerint mellékeredményként megkaptuk a δ -disztribúció egy előállítását:

$$\delta(z - z_0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{(z - z_0)^2 + \varepsilon^2}.$$

Vezessük most be a következő jelöléseket:

$$\delta_{\pm}(z - z_0) \equiv \mp \frac{1}{2\pi i} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{(z - z_0) \pm i\varepsilon}; \quad \delta(z) = \delta_+(z) + \delta_-(z).$$

Eszерint, azonos átalakítás után kapjuk:

$$\delta_+(z) = -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{z + i\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} e^{i\omega(z+i\varepsilon)} d\omega,$$

$$\delta_-(z) = +\frac{1}{2\pi i} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{z - i\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} e^{i\omega(z-i\varepsilon)} d\omega,$$

ahonnan

$$\delta(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega z - \varepsilon|\omega|} d\omega, \quad \varepsilon > 0,$$

a δ -disztribúció egyik integráلهőállítása.

A disztribúciós egyenletekben az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenet közvetlen elvégzése határozatlan kifejezésekre vezetne. Az ε -mennyiséget tartalmazó disztribúciókkal úgy dolgozunk, hogy először *véges* $\varepsilon > 0$ érték mellett számolunk; azaz megszorozzuk a disztribúciót a feladat szerinti szorzójával és integrálunk. Véges $\varepsilon > 0$ mellett ezek a műveletek matematikailag egyértelműek, de fizikai jelentése a kapott eredménynek nincs. Fizikailag értelmes végeredményt az integrálás *után* elvégzett $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenettel kapunk. Ebben a stádiumban a határátmenet már matematikailag is egyértelmű eredményre vezet.

A bebizonyítandó határértéktételünkben szereplő másik kifejezést, a

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(z) dz}{z - z_0} \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{z_0 - \varepsilon} + \int_{z_0 + \varepsilon}^{\infty} \right] \frac{f(z) dz}{z - z_0}$$

integrál-főértéket is disztribúciós alakban állítjuk elő:

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(z) dz}{z - z_0} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2} \left[\int_{\mathcal{G}_+} + \int_{\mathcal{G}_-} - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{G}_+^{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{G}_-^{\varepsilon}} \right] \frac{f(z) dz}{z - z_0}.$$

A Cauchy-formula felhasználásával tudunk tovább jutni:

$$\int_{\mathcal{G}_+^{\varepsilon}} \frac{f(z) dz}{z - z_0} = f(z_0) \int_0^{\pi} \frac{ire^{i\varphi} d\varphi}{re^{i\varphi}} = if(z_0),$$

$$\int_{\mathcal{G}_-^{\varepsilon}} \frac{f(z) dz}{z - z_0} = f(z_0) \int_{-\pi}^0 \frac{ire^{i\varphi} d\varphi}{re^{i\varphi}} = -i\pi f(z_0).$$

Így a főértékre nézve kapjuk az új \mathcal{G} integrációs út bevezetésével:

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(z) dz}{z - z_0} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{G}} \frac{f(z) dz}{z - z_0 + i\varepsilon} + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{G}} \frac{f(z) dz}{z - z_0 - i\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0.$$

A δ -disztribúció és a főértékoperátor összevethető kifejezései:

$$\delta(z - z_0) = \delta_+(z - z_0) + \delta_-(z - z_0) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z - z_0 + i\varepsilon} + \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z - z_0 - i\varepsilon},$$

$$\frac{1}{2\pi} \frac{P}{z - z_0} = -\delta_+(z - z_0) + \delta_-(z - z_0) = +\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z - z_0 + i\varepsilon} + \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z - z_0 - i\varepsilon}.$$

Az innen kapott

$$\delta_{\pm}(z) = \mp \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z - z_0 \pm i\varepsilon} = \pm \frac{i}{2\pi} \frac{P}{z - z_0} + \frac{1}{2} \delta(z - z_0)$$

egyenletpár már azonos a bevezetendő szimbolikus operátoregyenlettel, amelyet most nem-disztribúciós alakban is felírunk:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(z) dz}{z - z_0 \pm i\varepsilon} = \mp i\pi f(z_0) + P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(z) dz}{z - z_0}.$$

A másik disztribúcióelméleti tétel-párunk, amelyre szükségünk lesz:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{e^{i\omega t}}{\omega + i\varepsilon} = 0,$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \lim_{t \rightarrow -\infty} \frac{e^{i\omega t}}{\omega + i\varepsilon} = \delta(\omega).$$

Maga a tétel is igen meglepő, hiszen a két kifejezés abszolút értéke minden véges t -re megegyezik egymással. Látható, hogy a fellépő oszcilláció miatt, közönséges értelemben vett határértéke $t \rightarrow \pm\infty$ -re egyik kifejezésnek sincs, sem véges, sem infinitezimális ε mellett.

A levezetéshez segítségül vesszük a következő definíciót:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} g(t) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left[\varepsilon \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t'} g(t') dt' \right].$$

Ez a reláció, mint alább igazoljuk, egyszerű azonosságot jelent, ha az egyenlet bal oldalán álló határérték létezik. Az előállítás jelentősége abban áll, hogy értelmet ad a baloldali határértéknek abban az esetben is, ha a $g(t)$ függvény vagy korlátos a végtelenben, de nincs határértéke, pl. oszcillál, vagy legfeljebb exponenciálisan divergál. Más szóval, a jobboldali kifejezés reprodukálja a $g(t)$ függvény határértékét, ha az létezik, és definiálja, ha az nem létezik. Bizonyítása: parciális integ-

rálással kapjuk a jobboldalra vonatkozóan:

$$\varepsilon \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t} g(t) dt = [e^{-\varepsilon t} g(t)]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t} g'(t) dt = g(0) + \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t} g'(t) dt,$$

minden véges ε -ra. Ha most speciálisan az $\varepsilon \rightarrow 0$ határesetet nézzük, úgy

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\varepsilon \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t} g(t) dt \right] = g(0) - g(0) + g(\infty) = g(\infty),$$

ha a $g(t \rightarrow \infty)$ határérték létezik. Utolsó egyenletünk baloldala azonban e határérték lététől függetlenül, az exponenciálisan levágó szelídítőfaktor hatására, egyértelmű. Ezt a számot fogjuk érteni ezután a $\lim_{t \rightarrow \infty} g(t)$ határértéken. Ez az eljárás pl. az e^{ikr} ($k \neq 0$) kifejezés $r \rightarrow \infty$ határértékéül zérust definiál, mert

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{ikr} \equiv \lim_{\varepsilon=0} \left[\varepsilon \int_0^{\infty} e^{ikr} e^{-\varepsilon r} dr \right] = 0.$$

A végtelenbeli határérték fenti definíciója mellett igazolhatjuk tételeinket:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon=0} \lim_{t=\infty} \left[-\frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\varepsilon} \right] &= \lim_{\varepsilon=0} \frac{-\varepsilon}{2\pi i} \frac{1}{\omega + i\varepsilon} = \int_0^{\infty} e^{-i(\omega + i\varepsilon)t} dt = \\ &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon=0} \frac{\varepsilon}{\omega^2 + \varepsilon^2} = \delta(\omega). \end{aligned}$$

Ezzel szemben:

$$\lim_{\varepsilon=0} \lim_{t=\infty} \left[-\frac{1}{2\pi i} \frac{e^{i\omega t}}{\omega + i\varepsilon} \right] = \lim_{\varepsilon=0} \frac{-\varepsilon}{2\pi i} \frac{1}{\omega + i\varepsilon} \int_0^{\infty} e^{i(\omega + i\varepsilon)t} dt = 0.$$

Hasonló eljárással további relációkat kaphatunk:

$$\lim_{\varepsilon=0} \lim_{t=\infty} \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - i\varepsilon} = 0,$$

$$\lim_{\varepsilon=0} \lim_{t=\infty} \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{+i\omega t}}{\omega - i\varepsilon} = \delta(\omega),$$

ha a $t \rightarrow \infty$ határértéket a fenti integrállal definiáljuk. A levezetett összefüggések lehetővé teszik, hogy a disztribúciókkal (síkhullámokkal) úgy számoljunk, mint a Hilbert-tér elemeivel, a négyzetesen integrálható függvényekkel (hullámcsomagokkal) számolunk. A fenti egyenlőségek alkalmazásakor a disztribúciók ε -t tartalmazó kifejezésekbe mennek át. Véges $\varepsilon > 0$ -val számolva a felírt kifejezések matematikailag léteznek. De reális fizikai értelmet csak ezt követően, a hullámcsomagot jellemző spektrálfüggvénnyel való szorzás, energiaintegrálás és ezt követően $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenet útján kapunk.

A tranzitoperátor

Eddigi fogalmainkat most disztribúciókra vonatkozóan újra felírjuk. Így az in- és out-állapotokat a $|\mathbf{p}\rangle$ síkhullám kezdő- ill. végállapotból így kapjuk: (l. a 2. ábrát)

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \Omega_+ |\mathbf{p}\rangle,$$

$$|\mathbf{p}_{\text{out}}\rangle = \Omega_- |\mathbf{p}\rangle,$$

ahol

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}.$$

Kimutatjuk, a hullámoperátorokkal a síkhullámból generált in- és out-állapotok most is sajátfüggvényei a Hamilton-operátornak. Ugyanis

$$H|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = H\Omega_+ |\mathbf{p}\rangle = \Omega_+ H_0 |\mathbf{p}\rangle = \Omega_+ \frac{p^2}{2m} |\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle,$$

amivel állításunkat igazoltuk és sajátérték gyanánt $E = p^2/2m$ -et kaptunk.

További ismert mennyiségek, a hullámoperátor és a szórásoperátor mátrix-elemei most mind disztribúciók lesznek. Így az Ω_+ operátor mátrixeleme impulzus-ill. koordinátareprezentációban

$$\langle \mathbf{p} | \Omega_+ | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}'_{\text{in}} \rangle$$

és

$$\langle \mathbf{r} | \Omega_+ | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}'_{\text{in}} \rangle.$$

A szórási mátrixelem disztribúciók között képezve

$$S(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}'_{\text{out}} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle = \langle \mathbf{p}'_{\text{in}} | S | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle = \langle \mathbf{p}' | S' | \mathbf{p} \rangle.$$

Az itt szereplő függvények mind disztribúciók, de dolgozhatunk velük annak tudatában, hogy megfelelő spektrálfüggvénnyel szorozva és integrálva, hullámcsomagok leírására jutunk, fizikai és egyértelmű matematikai jelentéssel.

Definiáljuk a T tranzitoperátort. Potenciálszórás esetében legyen

$$T \equiv V\Omega_+.$$

A tranzitoperátorban szereplő Ω_+ operátor egy disztribúcióelméleti $e^{-\varepsilon t}$ szelídítőfaktor beépítésével így írható:

$$\Omega_+ = 1 - i \int_0^\infty e^{+iH_0 t} V \Omega_+ e^{-iH_0 t} e^{-\varepsilon t} dt.$$

Ezt hullámcsomagokra alkalmazva $\varepsilon > 0$, $\varepsilon = 0$ esetén egyaránt matematikailag létező kifejezéseket nyerünk. Síkhullámokra alkalmazva $\varepsilon > 0$ esetén adódik egyértelmű kifejezés, mert ekkor disztribúciókkal állunk szemben. Mivel tudjuk, hogy síkhullámokból hullámcsomagokat felépítve egyértelmű eredményt kell kapnunk, ez a „megszelídítés” az egyértelműséget nem ronthatja el. A mátrixelem képzésénél a H_0 hermiticitását és $|\mathbf{p}\rangle$, $|\mathbf{p}'\rangle$ sajátfüggvény-jellegét figyelembe véve

kapjuk:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}' | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle - i \int_{-\infty}^0 e^{iE't} \langle \mathbf{p}' | V \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle e^{iEt} e^{-\varepsilon t} dt = \\ &= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{\langle \mathbf{p}' | V \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle}{E' - E - i\varepsilon} = \\ &= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{\langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle}{E' - E - i\varepsilon}.\end{aligned}$$

Egyenletünk összekapcsolja az Ω_+ és a T operátorok mátrixelemeit. Hasonló jellegű kapcsolatot létesíthetünk az S és T operátorok mátrixelemei között:

$$\begin{aligned}S &= U(+\infty, -\infty); \\ \langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iE't} \langle \mathbf{p}' | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle e^{-iEt} = \\ &= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{e^{i(E' - E)t}}{E' - E + i\varepsilon}, \\ \langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle &= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - 2\pi i \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle \delta(E - E').\end{aligned}$$

Eszerint a tranzitoperátor értéke az energiahéjon meghatározza a szórásoptert.

A Lippmann—Schwinger egyenlet

Kapcsolatot akarunk létesíteni integrálegyenlet formájában a $|\mathbf{p}\rangle$ és a $|\mathbf{p}_{in}\rangle$ disztribúciók között, azaz a beeső síkhullám és a belőle kifejlődő fizikai állapot-függvény között. A kapcsolat természetesen az Ω_+ operátor levezetett reprezentációján alapszik. Így

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{in} \rangle = \langle \mathbf{r} | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle d^3 \mathbf{k},$$

ahol egy \mathbf{k} -térbeli teljes függvényrendszert építettünk be a

$$\sum |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| = 1$$

azonosság alapján. Az Ω_+ és a T operátorok mátrixelemeinek kapcsolata értelmében

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{in} \rangle &= \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \left[\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \rangle - \frac{\langle \mathbf{k} | T | \mathbf{p} \rangle}{E_k - E_p - i\varepsilon} \right] d^3 \mathbf{k} = \\ &= \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \frac{1}{E_k - E_p - i\varepsilon} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{p} \rangle d^3 \mathbf{k} d^3 \mathbf{r}',\end{aligned}$$

ahol most egy \mathbf{r} -térbeli teljességi összefüggést vezettünk be: $\int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d^3 \mathbf{r} = 1$. Most definiáljuk a szabadmozgás kifutójellegű Green-függvényét, mint egy \mathcal{G}_0^+ operátor koordinátareprezentációját:

$$\langle \mathbf{r} | \mathcal{G}_0^+ | \mathbf{r}' \rangle \equiv \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \frac{1}{E_p - E_k - i\varepsilon} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle d^3 \mathbf{k}.$$

Segítségével a $|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$ állapot a koordinátatérben

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \int \langle \mathbf{r} | \mathcal{G}_+^0 | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{p} \rangle d^3 \mathbf{r}'.$$

Most már csak a T operátor mátrixelemét kell kifejezni a V kölcsönhatási operátor segítségével a $T = V\Omega_+$ reláció révén:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{r}' | V\Omega_+ | \mathbf{p} \rangle = \int \langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle d^3 \mathbf{r}'' \\ &= \int \langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle d^3 \mathbf{r}'' = \\ &= \int V(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle d^3 \mathbf{r}'' = \\ &= V(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle. \end{aligned}$$

Hullámfüggvény-jelöléssel a síkhullámból kifejlődő állapot integrálegyenlete

$$\psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \int \mathcal{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'.$$

Ez a Lippmann—Schwinger-egyenlet (1950). Kiszámíthatjuk a szabadmozgás Green-függvényének explicit alakját is:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p) &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\frac{p^2}{2m} - \frac{k^2}{2m} + i\varepsilon} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3 \mathbf{k} = \\ &= \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d^3 \mathbf{k}}{p^2 - k^2 - 2mi\varepsilon}. \end{aligned}$$

Ismert eljárás szerint ebből megkaphatjuk a szabadmozgás Green-függvényének végleges kifejezését:

$$\mathcal{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p) = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Bevezetve a Green-függvény explicit alakját, a dinamika integrálegyenletének végleges alakját nyerjük:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \frac{m}{2\pi} \int \frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle d^3 \mathbf{r}'.$$

A szabad Green-függvény explicit alakjából a hullámfüggvény aszimptotikáját vezethetjük le abban az esetben, ha a kölcsönhatás véges hatótávolságú. Ekkor $r \rightarrow \infty$, $r' \ll r$ mellett

$$\begin{aligned} p|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| &= p[r^2 - r'^2 - 2rr' \cos(\mathbf{r}\mathbf{r}')]^{1/2} = \\ &= pr \left[1 - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2} + \dots \right] = \\ &\sim pr - \mathbf{p}'\mathbf{r}', \quad \text{ahol} \quad \mathbf{p}' \equiv \frac{\mathbf{p}}{r} \mathbf{r} \end{aligned}$$

a szórócentrumtól az \mathbf{r} megfigyelési pont felé mutató, p nagyságú impulzusvektor, tehát a szórt és detektált részecske impulzusa. Az in-állapot aszimptotikája nagy távolságban, koordinátareprezentációban

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{r} e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}'} \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{p} \rangle d^3\mathbf{r}',$$

vagy bevezetve a T operátor impulzusreprezentációját:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} - 4\pi^2 m \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{r} \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle.$$

A teljes hullámkép eszerint a beeső síkhullámból és olyan szórt hullámból áll, amely aszimptotikusan, legalábbis véges hatótávolságú erőcentrumon való szóródás esetén, tiszta kifutó gömbhullám. A szórt hullámban az $e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}/r$ gömbhullám $f(\theta)$ együtthatóját a H probléma szórási amplitúdójának nevezzük; ez arányos a T tranzitoperátor impulzus-reprezentációbeli mátrixelemével

$$f(\theta) = -4\pi^2 m \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle.$$

A hullámfüggvény aszimptotikája a szórási amplitúdóval kifejezve

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{r}.$$

A $\sigma(\theta)$ differenciális hatáskeresztmetszet, definíciója szerint, adott szórócentrumra vonatkozóan a centrumra illeszkedő egységnyi térszögbe szórt részek számának aránya az egységnyi felületen át beeső részekéhez. A hullámfüggvény aszimptotikus alakjából a fluxusok hányadosa meghatározható; az eredmény

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = 16\pi^4 m^2 |\langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle|^2.$$

A tranzitoperátor explicit kifejezése

A Lippmann—Schwinger egyenlet

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \mathcal{G}_+^0 V |\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$$

koordinátareprezentációban

$$\psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \int \mathcal{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p) V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

A $\mathcal{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p)$ szabad Green-függvényt tekintsük most egy operátor magjának és keressük ezt az operátort. A Green-függvény ekkor az operátor koordináta-reprezentációbeli mátrixeleme:

$$\langle \mathbf{r} | \mathcal{G}_+^0 | \mathbf{r}' \rangle = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \frac{1}{E - \frac{k^2}{2m} + i\epsilon} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle d^3\mathbf{k}.$$

A szabad Green-operátor impulzusrepresentációban tehát

$$\langle \mathbf{k} | \mathcal{G}_+^0 | \mathbf{k}' \rangle = \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{E - \frac{k^2}{2m} + i\varepsilon}.$$

Megegyezésben maradunk a fenti mátrixelemekkel, ha a szabad Green-operátor gyanánt a

$$\mathcal{G}_+^0(E) \equiv \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}$$

operátort tekintjük, hiszen ennek magfüggvénye

$$\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \mathcal{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p)$$

visszaadja a Green-függvényt. Az új felfogásban a Lippmann—Schwinger egyenlet

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$$

alakú.

A Lippmann—Schwinger-egyenlet formális megoldása

A hullámoperátorokra vonatkozó integrálegyenletet a Lippmann—Schwinger-egyenletből $|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \Omega_+ \mathbf{p}_-$ behelyettesítéssel azonnal megkapjuk:

$$\Omega_+ = 1 + \mathcal{G}_+^0 V \Omega_+.$$

Megoldása Ω_+ -ra iterációval adódik

$$\Omega_+ = \sum_{n=0}^{\infty} (\mathcal{G}_+^0 V)^n.$$

Innen a tranzitoperátor explicit kifejezés:

$$T \equiv V \Omega_+ = V \sum_{n=0}^{\infty} (\mathcal{G}_+^0 V)^n.$$

A tranzitoperátor kielégíti a következő integrálegyenletet:

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T.$$

Impulzusrepresentációban, jobb oldalon a $T \equiv V \Omega_+$, $|\mathbf{k}_{\text{in}}\rangle \equiv \Omega_+ |\mathbf{k}\rangle$ azonosság figyelembevételével:

$$\langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{p} \rangle + \int \frac{\langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{k}_{\text{in}} \rangle}{E - \frac{k^2}{2m} + i\varepsilon} d^3 \mathbf{k}.$$

A T -re vonatkozó integrálegyenletet megoldhatjuk, ha a Lippmann—Schwinger-egyenletet a szabad Green-operátor inverzével balról megszorozzuk:

$$(E - H_0 + i\varepsilon)|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = (E - H_0 + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle + V|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle.$$

Átrendezés után

$$(E - H + i\varepsilon)|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = (E - H + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle + V|\mathbf{p}\rangle.$$

Most balról szorzunk a H -probléma kifutójellegű Green-operátorával, a teljes Green-operátorral:

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \mathcal{G}_+ V|\mathbf{p}\rangle,$$

ahol a teljes kifutó Green-operátor

$$\mathcal{G}_+ \equiv \frac{1}{E - H + i\varepsilon}.$$

Az Ω_+ és a T operátorok explicit kifejezése a V potenciállal eszerint (Chew és Goldberger, 1952)

$$\Omega_+ = 1 + \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V,$$

$$T = V + V \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V.$$

A hullámoperátor, ill. a tranzitoperátor ezen előállítását nevezzük a Lippmann—Schwinger-egyenlet formális megoldásának.

A SZÓRÁSI AMPLITÚDÓ ANALITIKUS TULAJDONSÁGAI A NEMRELATIVISZTIKUS POTENCIÁLSZÓRÁS ELMÉLETÉBEN*

NYÍRI JÚLIA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Az erős kölcsönhatások elméletében mind a mai napig nem ismerünk pontos számítási módszert. Ezért, hogy a kölcsönhatás jellegéről valamilyen információt kapjunk, célravezetőnek tűnik a szórási amplitúdó tulajdonságainak vizsgálata általános feltételek mellett.

Jelen előadásban csak a nemrelativisztikus potenciálszórás esetére szorítkozunk.

1. A szórási amplitúdót meghatározó Fredholm-sor

Khuri vizsgálta a szórási amplitúdó analitikus tulajdonságait a k impulzus függvényében [1]. A továbbiakban az ő tárgyalásmódját fogjuk követni.

Tekintsük a Schrödinger-egyenletet a következő alakban:

$$[\nabla^2 + k^2 - \lambda V(r)]\psi(\vec{r}) = 0 \quad (1)$$

azaz

$$[\nabla^2 + k^2]\psi(\vec{r}) = \lambda V(r)\psi(\vec{r})$$

ahol $\hbar = c = 2M = 1$, tehát $k^2 = E$, a λ paramétert pedig a $V(r)$ potenciál kis távolságokon való viselkedése határozza meg.

Vezessük be a továbbiakban az $\vec{x} = \vec{r}$, $|\vec{x}| = r$ jelöléseket. Megmutatható, hogy az (1) megoldása lesz a következő integrálegyenlet:

$$\psi(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \lambda \int G_0(\vec{x}, \vec{y}) V(y) \psi(\vec{y}) d\vec{y}$$

ahol $\psi_0(\vec{x})$ és $G_0(\vec{x}, \vec{y})$ a szabad Schrödinger-egyenlet megoldása, illetve Green-függvénye:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_0(\vec{x}) = 0$$

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{x}, \vec{y}) = \delta(\vec{x} - \vec{y})$$

A határfeltételek megadása nélkül a megoldás nem egyértelmű. Megköveteljük, hogy nagy $|\vec{x}|$ esetén

$$\psi(\vec{x}) \sim e^{i\vec{k}\vec{x}} + \frac{e^{ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} f(k, \tau)$$

alakú legyen a megoldás. Itt $f(k, \tau)$ a szórási amplitúdó, $\tau^2 = (\vec{k} - \vec{k}')^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$

* Frenkel Andornak a III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskolán tartott előadása alapján.

a hármas impulzus-átadás, és adott k érték mellett

$$0 \leq \tau^2 \leq 4k^2.$$

Válasszuk a lehetséges Green-függvények közül a következőket:

$$G_0(\vec{x}, \vec{y}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{y}|}}{|\vec{x}-\vec{y}|}$$

$$\psi_0(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

Az integrálegyenlet így felírható a következő alakban:

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + \lambda \int K(\vec{x}, \vec{y}) \psi(\vec{y}) d\vec{y} \quad (2)$$

ahol

$$K(\vec{x}, \vec{y}) = -\frac{V(y)e^{ik|\vec{x}-\vec{y}|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{y}|} \quad (3)$$

A (2) integrálegyenlet megoldása az (1) eredeti Schrödinger-egyenletnek is megoldása lesz, és ha $V(y)$ megfelelő, úgy valóban a kívánt alakot kapjuk $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ esetére. Látható, hogy $\psi(\vec{x}) - e^{i\vec{k}\vec{x}} \equiv \psi_s(\vec{k}, \vec{x})$ ismeretében a szórási amplitúdó egyszerűen előállítható:

$$f(k, \tau) = \lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} [|\vec{x}| e^{-ik|\vec{x}|} \psi_s(\vec{k}, \vec{x})] \quad (4)$$

A $\psi(\vec{x})$ -re felírt integrálegyenletet kell tehát vizsgálni ahhoz, hogy információkat nyerjünk a szórási amplitúdóra vonatkozóan. A Fredholm-típusú integrálegyenletekre vonatkozó Appendix eredményeit azonban itt nem alkalmazhatjuk változtatás nélkül, mivel a (3) mag tulajdonságai eltérnek az ott megköveteltéktől az alábbiakban:

1. a probléma háromdimenziós;
2. a mag tartalmaz paramétereket is (k , és a potenciálban esetleg szereplő paraméterek);
3. a $K(\vec{x}, \vec{y})$ mag nem korlátos (az $\vec{x} = \vec{y}$ pontban szinguláris), az integrálási tartomány végtelen;
4. a szóban forgó integrálegyenlet magja komplex.

Lényeges nehézséget a 3. pontban jelzett különbség okoz. Egyszeri iterálás azonban már sokat javíthat a mag tulajdonságain. Az iterált egyenlet a következő lesz:

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + \lambda \int K(\vec{x}, \vec{y}) e^{i\vec{k}\vec{y}} d\vec{y} + \lambda^2 \iint K(\vec{x}, \vec{z}) K(\vec{z}, \vec{y}) \psi(\vec{y}) d\vec{z} d\vec{y}$$

vagy

$$\psi(\vec{x}) = F(\vec{k}, \vec{x}) + \lambda^2 \int K_2(\vec{x}, \vec{y}) \psi(\vec{y}) d\vec{y}, \quad (5)$$

ahol

$$F(\vec{k}, \vec{x}) = e^{i \vec{k} \vec{x}} + \lambda \int K(\vec{x}, \vec{y}) e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{y}$$

és

$$K_2(\vec{x}, \vec{y}) = \int K(\vec{x}, \vec{z}) K(\vec{z}, \vec{y}) d\vec{z}$$

Az (5) megoldása formálisan felírható a következő alakban:

$$\psi(\vec{k}, \vec{x}) = F(\vec{k}, \vec{x}) + \lambda^2 \int \frac{\Delta(\lambda^2, k; \vec{x}, \vec{y})}{\Delta(\lambda^2, k)} F(\vec{k}, \vec{y}) d\vec{y} \quad (6)$$

Itt

$$\Delta(\lambda^2, k; \vec{x}, \vec{y}) = K_2(\vec{x}, \vec{y}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda^2)^n}{n!} \int d\vec{x}_1 \dots \int d\vec{x}_n B^{(n)}(k; \vec{x}, \vec{y}, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$$

$$\Delta(\lambda^2, k) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda^2)^n}{n!} \int d\vec{x}_1 \dots \int d\vec{x}_n D^{(n)}(k; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n),$$

$B^{(n)}$ és $D^{(n)}$ pedig a Fredholm-determinánsok:

$$B^{(n)}(k; \vec{x}, \vec{y}, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) = \begin{vmatrix} K_2(\vec{x}, \vec{y}) & K_2(\vec{x}, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}, \vec{x}_n) \\ K_2(\vec{x}_1, \vec{y}) & K_2(\vec{x}_1, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}_1, \vec{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_2(\vec{x}_n, \vec{y}) & K_2(\vec{x}_n, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}_n, \vec{x}_n) \end{vmatrix}$$

$$D^{(n)}(k; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) = \begin{vmatrix} K_2(\vec{x}_1, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}_1, \vec{x}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_2(\vec{x}_n, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}_n, \vec{x}_n) \end{vmatrix}$$

Jost és Pais megmutatták [2], hogy ha

$$V(r) \leq \frac{M'}{r^2} \quad \text{és} \quad \int_0^{\infty} r |V(r)| dr \leq M < \infty,$$

akkor az iterált egyenletre alkalmazhatók a Fredholm-módszerek tetszőleges fizikai k esetében, tehát akkor, ha k valós, és teljesül a $k \geq \frac{1}{2}\tau$ feltétel. A számításokból kitűnik, hogy ha λ valós, úgy a megoldásban (6) $\Delta(\lambda^2, k)$ -nak nincs zérushelye valós $k \neq 0$ -ra. A homogén egyenlet megoldásait valós csatolási állandó esetén tehát komplex impulzusértéknél kell keresni.

Egyszerűen kifejezhető a szórási amplitúdó (4) az integrálegyenlet megoldása segítségével:

$$\psi_s(\vec{k}, \vec{x}) = \lambda \int K(\vec{x}, \vec{y}) e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{y} + \lambda^2 \int \frac{\Delta(\lambda^2, k; \vec{x}, \vec{y})}{\Delta(\lambda^2, k)} F(\vec{k}, \vec{y}) d\vec{y} \quad (7)$$

Innen megkaphatjuk az amplitúdót a következő alakban:

$$\begin{aligned}
 f(k, \tau) = & -\frac{\lambda}{4\pi} \int e^{-i \vec{k}' \vec{y}} V(y) e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{y} - \frac{\lambda^2}{4\pi} \int e^{-i \vec{k}' \vec{z}} N_2(\vec{z}, \vec{y}) e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{z} d\vec{y} - \\
 & -\frac{\lambda^3}{4\pi} \int e^{-i \vec{k}' \vec{z}} N_3(\vec{z}, \vec{y}) e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{z} d\vec{y} - \frac{\lambda^4}{4\pi} \int e^{-i \vec{k}' \vec{z}} \frac{N_4(\vec{z}, \vec{y})}{\Delta(\lambda^2, k)} e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{z} d\vec{y} - \\
 & -\frac{\lambda^5}{4\pi} \int e^{-i \vec{k}' \vec{z}} \frac{N_5(\vec{z}, \vec{y})}{\Delta(\lambda^2, k)} e^{i \vec{k} \vec{y}} d\vec{z} d\vec{y}
 \end{aligned} \quad (8)$$

ahol

$$N_2(\vec{z}, \vec{y}) = V(z) K(\vec{z}, \vec{y}),$$

$$N_3(\vec{z}, \vec{y}) = V(z) K_2(\vec{z}, \vec{y}),$$

$$N_4(\vec{z}, \vec{y}) = V(z) \int K(\vec{z}, \vec{x}_1) \Delta(\lambda^2, k; \vec{x}_1, \vec{y}) d\vec{x}_1,$$

$$N_5(\vec{z}, \vec{y}) = V(z) \int K(\vec{z}, \vec{x}_1) \Delta(\lambda^2, k; \vec{x}_1, \vec{x}_2) K(\vec{x}_2, \vec{y}) d\vec{x}_1 d\vec{x}_2$$

Vezessük be a továbbiakban a következő új változókat:

$$\vec{\pi} = \frac{1}{2} (\vec{k} + \vec{k}') \quad \vec{r} = \vec{y} - \vec{z}$$

$$\vec{\tau} = \vec{k} - \vec{k}' \quad \vec{R} = \frac{1}{2} (\vec{y} + \vec{z})$$

akkor felírhatjuk a szórási amplitúdót az alábbi módon:

$$f(k, \tau) = -\frac{\lambda}{4\pi} \tilde{V}(\tau) + G_2(k, \tau) + G_3(k, \tau) + \frac{G_4(k, \tau)}{\Delta(\lambda^2, k)} + \frac{G_5(k, \tau)}{\Delta(\lambda^2, k)} \quad (9)$$

Itt

$$G_j(k, \tau) = -\frac{\lambda^j}{4\pi} \int e^{i \left(k^2 - \frac{1}{4} \tau^2 \right)^{1/2} \vec{n} \cdot \vec{r}} N_j \left(\vec{R} - \frac{1}{2} \vec{r}, \vec{R} + \frac{1}{2} \vec{r} \right) e^{i \vec{\tau} \cdot \vec{R}} d\vec{r} d\vec{R}$$

$$j = 2, 3, 4, 5; \quad \vec{n} = \frac{\vec{\pi}}{|\vec{\pi}|}$$

és

$$\tilde{V}(\tau) = \int e^{i \vec{\tau} \cdot \vec{y}} V(y) d\vec{y}.$$

$G_j(k, \tau)$ nem függ a $\vec{\tau}$ és \vec{n} irányoktól. Könnyű belátni, hogy $G_j(k, \tau) = G_j^*(-k, \tau)$. Fizikai tartományban, tehát $k \geq \frac{1}{2} \tau$ esetében valamennyi G_j létezik és egyenletesen konvergál a potenciálok egy meglehetősen széles osztályában, nevezetesen, ha $\int_0^\infty r |V(r)| dr$ és $\int_0^\infty r^2 |V(r)| dr$ véges. A továbbiakban mi azonban komplex impulzusértékekkel kívánunk foglalkozni az $\text{Im } k \geq 0$ félsíkon. Ehhez nemfizikai esetre ($|k| < \frac{1}{2} \tau$) is definiálnunk kell a szórási amplitúdót.

2. $G_j(k, \tau)$, $\Delta(\lambda^2, k)$ analitikus tulajdonságai.
Összefüggés a kötött állapotokkal

Terjesszük ki tehát a $G_j(k, \tau)$ értelmezési tartományát a k -sík felső téréfelére. Bizonyítható, hogy ha a potenciálra teljesül a következő három feltétel:

$$|V(r)| \leq \frac{M'}{r^2} \quad (10)$$

$$\int_0^\infty r |V(r)| dr \leq M < \infty \quad (11)$$

$$\int_0^\infty e^{2r} r^2 |V(r)| dr \leq L < \infty \quad (12)$$

akkor valós τ értékre $\frac{1}{2}\tau \leq \alpha$ esetben az $\text{Im } k > 0$ térfélen a $G_j(k, \tau)$ függvények analitikusak k -ban és egyenletesen korlátosak. Megmutatható továbbá, hogy $\text{Im } k \geq 0$ tartományban $|k| \rightarrow \infty$ esetben $D(\lambda^2, k; \vec{x}, \vec{y}) \rightarrow 0$. Vizsgáljuk most a $\Delta(\lambda^2, k)$ tulajdonságait. Kiterjesztve a komplex k -síkra:

$$\Delta(\lambda^2, k) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda^2)^n}{n!} \int d\vec{x}_1 \dots \int d\vec{x}_n D^{(n)}(k; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) \quad (13)$$

ahol

$$D^{(n)}(k; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)_n = \begin{vmatrix} K_2(\vec{x}_1, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}_1, \vec{x}_n) \\ \vdots & & \vdots \\ K_2(\vec{x}_n, \vec{x}_1) & \dots & K_2(\vec{x}_n, \vec{x}_n) \end{vmatrix} \quad (14)$$

A sor minden tagjáról információt kaphatunk a magok ismeretében. K_2 analitikus $\text{Im } k \geq 0$ esetre, és ezért az Hadamard-lemma értelmében a $D^{(n)}(k; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$ is analitikus és egyenletesen korlátos. A $\Delta(\lambda^2, k)$ függvényre felírt sor abszolút és egyenletesen konvergál, ha $\text{Im } k \geq 0$, így $\Delta(\lambda^2, k)$ is analitikus függvény. Látható tehát, hogy a szórási amplitúdó a felső félsíkon mindenütt analitikus, kivéve a $\Delta(\lambda^2, k)$ esetleges zérushelyeit, ahol az $f(k, \tau)$ -nak pólusa van. A $\Delta(\lambda^2, k)$ λ függvényében a $\lambda = \pm \lambda_n$ helyen válik zérussá, ahol λ_n a homogén egyenlet sajátértéke.

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{x}) = \lambda_n \int K(\vec{x}, \vec{y}) \psi_n(\vec{k}, \vec{y}) d\vec{y} \quad (15)$$

Rögzítsük a továbbiakban λ -t. Tudjuk, hogy ha $\Delta(\lambda^2, k) = 0$, a homogén egyenletnek megoldása van. Láttuk, hogy valós $k \neq 0$ esetén a $\Delta(\lambda^2, k)$ csak komplex λ -értékekre válhat zérussá. A továbbiakban megmutatjuk, hogy ha λ valós, úgy az $\text{Im } k \geq 0$ térfélen csak az imaginárius tengelyen lehet megoldása a homogén egyenletnek.

A Schrödinger-egyenlet felhasználásával felírhatjuk az alábbi összefüggést:

$$\begin{aligned} i \operatorname{div}(\psi_n^* \operatorname{grad} \psi_n - \psi_n \operatorname{grad} \psi_n^*) &= i(\psi_n^* \Delta \psi_n - \psi_n \Delta \psi_n^*) = \\ &= i[\psi_n^*(-k^2)\psi_n + \psi_n k_n^{2*} \psi_n^*] = i(k^{*2} - k^2) \psi_n^* \psi_n \end{aligned}$$

Integrálva egy nagy V térfogatra, a következőket kapjuk:

$$i \oint (\psi_n^* \nabla \psi_n - \psi_n \nabla \psi_n^*) d\vec{s} = i(k_n^{*2} - k_n^2) \int_V |\psi_n|^2 d\vec{x}.$$

Innen, figyelembe véve, hogy nagy $|\vec{x}|$ -ekre

$$\psi_n(\vec{k}_n, \vec{x}) \sim \frac{e^{ik_n|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} f_n(k_n, \tau), \quad (16)$$

az alábbi kifejezést nyerjük:

$$-(k_n + k_n^*) e^{i(k_n - k_n^*)} \int |f_n(k_n, \tau)|^2 d\Omega = i(k_n^{*2} - k_n^2) \int_V |\psi_n|^2 d\vec{x},$$

és, ha $\text{Im } k_n \geq 0$, $\text{Re } k_n \neq 0$, úgy

$$-e^{-2\text{Im } k_n |\vec{x}|} \int |f_n(k_n, \tau)|^2 d\Omega = 2 \text{Im } k_n \int_V |\psi_n|^2 d\vec{x}$$

vagyis ellentmondáshoz jutottunk. Egyetlen lehetőségként marad tehát:

$$k_n^* + k_n = 0, \quad \text{azaz} \quad k_n = i \text{Im } k_n,$$

ami azt jelenti, hogy a $\Delta(\lambda^2, k)$ függvénynek valós λ mellett valóban csak a képzetes k -tengelyen lehet zérushelye.

Ebben az esetben

$$\psi_n(\vec{k}_n, \vec{x}) = \frac{e^{-\text{Im } k_n |\vec{x}|}}{|\vec{x}|} f_n(k_n, \tau), \quad (17)$$

ami egy exponenciálisan lecsengő, normálható állapot, tehát a részecske a szórócentrum közelében marad. $E_n = k_n^2 = -\text{Im } k_n^2 < 0$, ebből is látszik, hogy a $\Delta(\lambda^2, k)$

zérushelyeihez kötött állapotok tartoznak. $\int_0^\infty r |V(r)| dr \leq M < \infty$ esetében a kötött

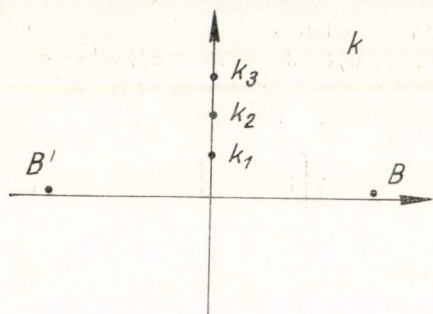
állapotok száma véges. Könnyű belátni hogy az a legkisebb csatolási állandó, amely-nél kötött állapot létrejöhet, egyúttal a Born-sor konvergenciasugarának felső határa is. Ha létezik egy kisenergiájú kötött állapot fizikai csatolási állandóval, úgy általában a Born-sor nem, vagy csak nagyon kis tartományon belül konvergál.

3. Diszperziós összefüggések

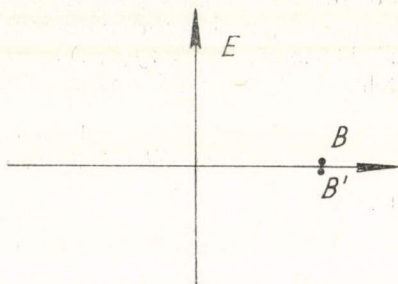
Írjuk át a (9) kifejezést a következőképpen:

$$g(k, \tau) = f(k, \tau) + \frac{\lambda \tilde{V}(r)}{4\pi} = G_2(k, \tau) + G_3(k, \tau) + \frac{G_4(k, \tau)}{\Delta(\lambda^2, k)} + \frac{G_5(k, \tau)}{\Delta(\lambda^2, k)}. \quad (18)$$

Láttuk, hogy $g(k, \tau)$ az $\text{Im } k > 0$ térfélen analitikus, eltekintve az imaginárius ten-



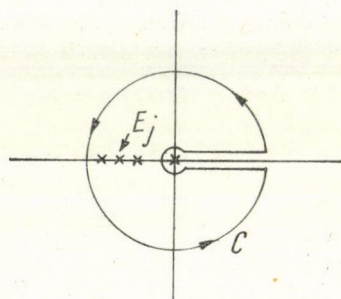
1. ábra



2. ábra

gelyen elhelyezkedő pólusoktól (1. ábra). Térjünk át a $k^2 = E$ síkra úgy, hogy a pozitív k -tengely felső partját képezzük le a pozitív E -tengely felső partjára (2. ábra). Mint ismeretes, ilyen leképezés esetén az E -síkot fel kell vágni.

Legyen a továbbiakban $\Phi(E, \tau) \equiv g(k, \tau)$. A $\Phi(E, \tau)$ függvény analitikus lesz mindenütt az energiasíkon, kivéve a vágást a pozitív, és a pólusokat a negatív valós tengely mentén. Felhasználva a Cauchy-képletet és integrálva C körül (3. ábra), a következő kifejezést nyerjük:



3. ábra

$$\oint_C \frac{\Phi(E', \tau)}{E' - E} dE' = 2\pi i \sum_{j=1}^N \frac{R_j(\tau)}{E_j - E}; \quad E_j < 0$$

ahol $R_j(\tau)$ a $\Phi(E', \tau)$ residuum a lehetséges E_j kötött állapot helyén.

A nagy kör járulékát az integrálásban el lehet hanyagolni és így az alábbi diszperziós összefüggést kapjuk:

$$\operatorname{Re} \Phi(E, \tau) = \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{Im} \Phi(E', \tau)}{E' - E} dE' + \sum_{j=0}^N \frac{R_j(\tau)}{E - E_j} \quad (19)$$

Itt $E_0 = 0$,

$R_0(\tau)$ a residuum az $E = 0$ pontban.

Felírhatjuk a diszperziós relációkat magára a szórási amplitúdóra is. Legyen $f(k, \tau) \equiv M(E, \tau)$, akkor

$$\operatorname{Re} M(E, \tau) = \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{Im} M(E', \tau)}{E' - E} dE' + \sum_{j=0}^N \frac{R_j(\tau)}{E - E_j} - \frac{\lambda}{4\pi} \tilde{V}(\tau) \quad (20)$$

A diszperziós összefüggés $\frac{1}{2}\tau \leq \alpha$ esetén érvényes, tehát $\tau=0$ mellett az $\alpha=0$ is megengedett, ami egy nagyon széles potenciálosztályt jelent. A $0 < E < \frac{1}{4}\tau^2$ nem-fizikai tartományban az $f(k, \tau)$ szórási amplitúdó a parciális hullámsor segítségével értelmezhető, amelyről megmutatható, hogy $\tau < \alpha$ esetben konvergens.

$$f(k, \tau) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l(k)} - 1) P_l \left(1 - \frac{\tau^2}{2k^2} \right) \quad (21)$$

ahol

$$\cos \theta = 1 - \frac{\tau^2}{2k^2}$$

A szórási amplitúdót $P_l(\cos \theta)$ szerint sorbafejtve megállapíthatjuk, hogy milyen l impulzusmomentum értékhez tartozik kötött állapot.

Megjegyezzük még, hogy a fizikai energiasíkon természetesen csak a kötött állapotoknak megfelelő pólusokat tudtuk ábrázolni. A második Riemann-levélen további lényeges tulajdonságokat jellemző pólusok szerepelhetnek, nevezetesen a rezonancia-pólusok.

4. A szórási amplitúdó analitikus tulajdonságai a τ függvényében

A diszperziós összefüggésben az integrálás alsó határa 0, τ viszont általában zérusnál nagyobb. Így megjelennek a kifejezésben olyan $M(E', \tau)$ értékek, amelyek nem felelnek meg fizikai amplitúdóknak. Ezeket az értékeket megkísérelhetjük megkapni az amplitúdó τ szerinti analitikus folytatása segítségével.

Blankenbecler, Goldberger és mások [3] vizsgálták a szórási amplitúdó analitikus tulajdonságait τ -ban. Feltételezték, hogy a potenciál felírható a Yukawa-potenciálok szuperpozíciójaként:

$$V(r) = \int_m^\infty d\mu \sigma(\mu) \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad m \geq 0,$$

és (feltéve, hogy $m \geq \alpha$) továbbra is érvényben vannak a (10), (11) és (12) feltételek, amelyekből következik, hogy

$$\sigma(\mu) \rightarrow 0, \quad \text{ha } \mu \rightarrow \infty$$

és

$$\frac{\sigma(\mu)}{\mu} \rightarrow 0, \quad \text{ha } \mu \rightarrow 0.$$

A $\sigma(\mu)$ általában korlátos, de tartalmazhat δ -jellegű szingularitásokat, így felírhatjuk a következő alakban:

$$\sigma(\mu) = \delta(\mu - m_0) + \varrho(\mu),$$

ahol

$$\varrho(\mu) = 0, \quad \text{ha } \mu < m_0.$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\tau^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) \equiv -t,$$

$$4k^2 = 4E \equiv s.$$

Ha a szórási amplitúdó analitikus tulajdonságait vizsgáljuk, kényelmes leválasztani a Born-sor első tagját:

$$\begin{aligned} f_B(\tau) &= -\frac{1}{4\pi} \tilde{V}(\tau) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{\tau}\vec{x}} V(x) d\vec{x} = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty d\mu \frac{\sigma(\mu)}{\mu^2 + \tau^2} = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty d\mu \frac{\sigma(\mu)}{\mu^2 - t^2} = f_B(t) \end{aligned} \quad (22)$$

Innen látszik, hogy $f_B(t)$ analitikus a teljes t síkon, kivéve egy, az m^2 -nél kezdődő vágást a pozitív valós tengelyen, és esetleges pólusokat (ha a potenciál δ -függvényeket is tartalmaz). Megjegyezzük, hogy a fizikai t mindig ≤ 0 .

Ha a Born-sor jól konvergálna, megelégedhetnénk az első tag vizsgálatával. Mivel ez azonban általában nincs így, a továbbiakban a teljes szórási amplitúdó tulajdonságait fogjuk vizsgálni a $\cos \theta$, illetve t -síkon $k^2 \geq 0$, azaz $s \geq 0$ esetre.

Tekintsük az amplitúdóra vonatkozó Lippmann–Schwinger-egyenletet:

$$f(\vec{k}_f, \vec{k}_i) = f_B(\vec{k}_f, \vec{k}_i) - \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{V}(\vec{k}_f - \vec{k}')}{k'^2 - k^2 - i\varepsilon} f(\vec{k}', \vec{k}_i) \quad (23)$$

ahol \tilde{V} a potenciál Fourier-transzformáltja, $\vec{\tau} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ és $\cos \theta = \frac{\vec{k}_f \vec{k}_i}{|\vec{k}_f| |\vec{k}_i|}$.

Az integrálegyenlet magja

$$K(\vec{k}_f, \vec{k}_i) = \frac{\tilde{V}(\vec{k}_f - \vec{k}_i)}{k'^2 - k^2 - i\varepsilon};$$

a λ csatolási állandó a $\sigma(\mu)$ -ben szerepel. Az egyenlet megoldása a következő:

$$f(\vec{k}_f, \vec{k}_i) = f_B(\vec{k}_f, \vec{k}_i) + \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^2} \frac{\tilde{A}(\vec{k}_f, \vec{p}; k)}{\Delta(k)} f_B(\vec{p}, \vec{k}_i) \quad (24)$$

Ha a potenciálok kielégítik a tett feltételeket, úgy a $\Delta(k)$ -ra és $\tilde{A}(\vec{k}_f, \vec{p}; k)$ -ra felírható sorok egyenletesen konvergálnak [2]. $\Delta(k)$ nem függ a \vec{k}_i és \vec{k}_f irányoktól, így nem befolyásolja $f(\vec{k}_f, \vec{k}_i)$ viselkedését a $\cos \theta$ -síkon. $\tilde{A}(\vec{k}_f, \vec{p}; k)$ a $\Delta(\vec{x}, \vec{y}; k)$ Fourier-transzformáltja:

$$\tilde{A}(\vec{k}_f, \vec{p}; k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{V}(\vec{k}_f, \vec{p})}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{(2\pi)^{3n} n!} \frac{1}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} \int \prod_{i=1}^n \frac{d\vec{p}_i}{p_i^2 - k^2 - i\varepsilon} \times \quad (25)$$

$$\times \begin{vmatrix} \tilde{V}(\vec{k}_f, \vec{p}) & \tilde{V}(\vec{k}_f, \vec{p}_1) & \dots & \tilde{V}(\vec{k}_f, \vec{p}_n) \\ \tilde{V}(\vec{p}_1, \vec{p}) & 0 & \tilde{V}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) & \dots \\ \vdots & & & \\ \tilde{V}(\vec{p}_n, \vec{p}) & \tilde{V}(\vec{p}_n, \vec{p}_1) & \dots & 0 \end{vmatrix}$$

ahol

$$\tilde{V}(\vec{p}_i, \vec{p}_j) = \tilde{V}(\vec{p}_i - \vec{p}_j)$$

A determináns kifejtése után a sor általános tagja a következő alakot nyeri:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_l^{(n)}(\vec{k}_f, \vec{p}; k) &= \int \prod_{j=1}^l \frac{d\vec{p}_j}{p_j^2 - k^2 - i\varepsilon} \times \\ &\times \frac{F_l^{(n)}(k)}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} \tilde{V}(\vec{k}_f, \vec{p}_1) \tilde{V}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \dots \tilde{V}(\vec{p}_{l-1}, \vec{p}_l) V(\vec{p}_l, \vec{p}) \end{aligned} \quad (26)$$

Itt $l \leq n$, az $F_l^{(n)}(k)$ pedig a fennmaradt $(\vec{p}_{l+1}, \vec{p}_{l+2}, \dots, \vec{p}_n)$ impulzusokra való integrálás eredményeképpen kapott függvény.

Felhasználva a

$$\tilde{V}(\vec{p}_i - \vec{p}_j) \sim \int_0^\infty \frac{\sigma(\mu) d\mu}{\mu^2 + (\vec{p}_i - \vec{p}_j)^2}$$

összefüggést, látjuk, hogy $\tilde{A}_l^{(n)}(\vec{k}_f, \vec{p}; k)$ az $f' = f - f_B$ kifejezésbe a következő járulékot adja:

$$\begin{aligned} f_l'^{(n)}(\vec{k}_f, \vec{k}_i) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{F_l^{(n)}(k)}{\Delta(k)} \int \prod_{i=1}^{l+1} \frac{\sigma(\mu_i) d\mu_i dp_i}{2[p_i^2 - k^2 - i\varepsilon]} \frac{\sigma(\mu_{l+2}) d\mu_{l+2}}{2k^2} \times \\ &\times \int d\Omega_1 \dots d\Omega_{l+1} [\lambda_1 - \hat{k}_f \cdot \hat{p}_1]^{-1} [\lambda_2 - \hat{p}_1 \cdot \hat{p}_2]^{-1} \dots [\lambda_{l+2} - \hat{p}_{l+1} \cdot \hat{k}_i]^{-1} \end{aligned} \quad (27)$$

ahol \hat{k}_f, \hat{k}_i és \hat{p}_j — egységvektorok, és $\lambda_j \geq 1$.

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \frac{\mu_j^2 + p_{j-1}^2 + p_j^2}{2p_{j-1}p_j} \quad (1 < j < l+2) \\ \lambda_1 &= \frac{\mu_1^2 + k^2 + p_1^2}{2kp_1} \\ \lambda_{l+2} &= \frac{\mu_{l+2}^2 + p_{l+2}^2 + k^2}{2p_{l+1}k} \end{aligned}$$

A továbbiakban integrálni kell a szögváltozókra.

$$I = \int d\Omega_{\hat{p}} \frac{1}{\tau_1 - \hat{p}_1 \hat{p}} \frac{1}{\tau_2 - \hat{p} \hat{p}_2} = 4\pi \int_{\eta_0}^\infty d\eta \frac{1}{\eta - \hat{p}_1 \hat{p}_2} \frac{1}{K(\eta)}$$

Itt

$$\begin{aligned} \eta_0 &= \tau_1 \tau_2 + (\tau_1^2 - 1)^{1/2} (\tau_2^2 - 1)^{1/2}, \\ K(x) &= [(\tau_1 \tau_2 - x)^2 - (\tau_1^2 - 1)(\tau_2^2 - 1)]^{1/2} \end{aligned}$$

Az integrálást többször megismételve, a következő eredmény adódik:

$$f_l'^{(n)}(k, \cos \theta) = \int_{\eta_{0l}^{(n)}}^\infty d\eta \frac{\varphi_l^{(n)}(\eta, k)}{\eta - \cos \theta}$$

és könnyű megmutatni, hogy

$$\eta_0^{(n)} \cong 1 + \frac{2m^2}{k^2}$$

Rögzített k értéknél a Fredholm-sor minden egyes tagja analitikus a teljes $\cos \theta$ síkban, kivéve egy vágást a pozitív valós tengelyen $\cos \theta = 1 + \frac{2m^2}{k^2}$ -től ∞ -ig (4. ábra). A vágás a

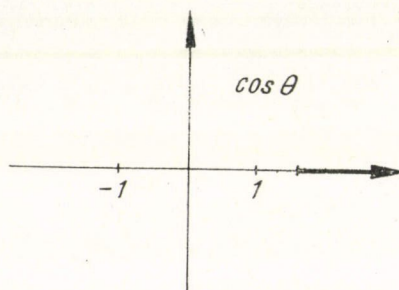
fizikai tartományon kívül van, ha $m \neq 0$. Az $f_l^{(n)}$ -eket tartalmazó sorról bizonyítható, hogy abszolút és egyenletesen konvergens.

Végeredményben:

$$f'(k_f, k_i) = \int_{\eta_0} d\eta \frac{\varphi(\eta, k)}{\eta - \cos \theta}; \quad \eta_0 \cong 1 + \frac{2m^2}{k^2} \cong 1$$

analitikus függvény a felvágott $\cos \theta$ síkban. Bizonyítható az amplitúdóra kapott eredmény annak komplex konjugáltjára, tehát külön a valós és képzetes részre is.

Megállapíthatjuk továbbá, hogy f' a $k^2 = s$ és $t = 2s(1 - \cos \theta)$ függvényében analitikus a t -síkon egy, a $-\infty$ -tól $-4m^2$ -ig terjedő vágást kivéve.



4. ábra

5. A Mandelstam-reprezentáció

Láttuk, hogy a diszperziós összefüggések bizonyíthatók valós $t \leq 4m^2$ -re. A továbbiakban megmutatjuk, hogy érvényességük kiterjeszthető a teljes komplex t -síkra.

Induljunk ki az egyszeres diszperziós relációkból:

$$f(s, t) = f_B(t) + \sum_j \frac{R_j(t)}{s_j - s} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty ds' \frac{\text{Im} f(s', t)}{s' - s - i\epsilon} \quad \text{Im} s \neq 0 \quad (28)$$

Mivel $s' \geq 0$ esetben $\text{Im} f(s', t)$ analitikus, felírhatjuk a következő összefüggést:

$$\text{Im} f(s', t) = \frac{1}{\pi} \int_{t_0(s')}^\infty dt' \frac{\varrho(s', t')}{t' - t} \quad t_0(s') \cong 4m^2 \quad (29)$$

Ez igaz akkor, ha teljesül az

$$\text{Im} f(s', t) \rightarrow 0 \quad |t| \rightarrow \infty \quad (30)$$

feltétel. Ha nem, akkor levonásokat kell alkalmazni és (29) a következőképpen módosul:

$$\text{Im} f(s', t) = \frac{t^{n+1}}{\pi} \int_{t_0(s')}^\infty dt' \frac{\varrho(s', t')}{t'^{n+1}(t' - t)} + \sum_{j=0}^n \frac{t^j (-1)^j}{j!} g_k(s') \quad (29a)$$

Felhasználva a (29) összefüggést, a következő dupla diszperziós relációt kapjuk:

$$f(s, t) = f_B(t) + \sum_j \frac{R_j(t)}{s_j - s} + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty ds' \int_{t_0(s')}^\infty dt' \frac{\varrho(s', t')}{(t' - t)(s' - s - i\varepsilon)} \quad (31)$$

Ez az úgynevezett Mandelstam-reprezentáció. Potenciálszórás esetében a $\varrho(s, t)$ meghatározható, hiszen felírhatunk rá egy megoldható integrálegyenletet.

Előfordulhat, hogy a potenciálhoz kicserélődési tagok is járulnak:

$$V(x) = V_e(x) + V_0(x) = V_1(x) + V_2(x)P_x, \quad (32)$$

ahol P_x a felcserélési operátor. Ebben az esetben

$$f = f_e + f_0$$

és

$$\begin{aligned} f_e(s, t) &= f_e^B(t) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty ds' \frac{\text{Im} f_e(s', t)}{s' - s - i\varepsilon} \\ f_0(s, u) &= f_0^B(u) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty ds' \frac{\text{Im} f_0(s', u)}{s' - s - i\varepsilon} \end{aligned} \quad (33)$$

ahol az alábbi változók szerepelnek:

$$u = -(\vec{k}_f + \vec{k}_i)^2 = -2k^2(1 + \cos \theta)$$

$$t = -(\vec{k}_f - \vec{k}_i)^2 = -2k^2(1 - \cos \theta)$$

$$s = 4k^2$$

$$s + t + u = 0.$$

Felhasználva a kapott kifejezéseket, a következő diszperziós összefüggést kapjuk:

$$\begin{aligned} f(s, t, u) &= f_e^B(t) + f_0^B(u) + \sum_j \frac{R_j(t)}{s_j - s} + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty ds' \int_{4m^2}^\infty dt' \frac{\varrho_e(s', t')}{(s' - s)(t' - t)} + \\ &+ \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty ds' \int_{4m^2}^\infty du' \frac{\varrho_0(s', u')}{(s' - s)(u' - u)} + \text{esetleges levonások } t\text{-ben és } u\text{-ban.} \end{aligned} \quad (34)$$

A kötött állapotokba beleértjük V_0 járulékát is. $R_j(t)$ arányos t olyan legmagasabb hatványával, amely az s_j kötött állapothoz tartozik, tehát pl. $f(s, t, u) \sim |t|^l$ $|t| \rightarrow \infty$ esetén, ha l -es kötött állapot van. Ezért nyilvánvaló, hogy ilyenkor levonásra van szükség.

Ha nincsenek kötött állapotok, akkor remélhetjük, hogy teljesül a (30) feltétel, tehát nem kell levonást alkalmaznunk.

6. Az uniteritási feltétel

Mint már említettük, a $q(s, t)$ meghatározható egy integrálegyenletből, amelyet az uniteritási feltételből nyerünk. Lássuk tehát először a nevezett feltételt:

$$SS^+ = 1$$

$$S - 1 = iT,$$

innen

$$SS^+ = (iT + 1)(-iT + 1) = 1 + i(T - T^+) + TT^+ = 1$$

$$i(T - T^+) = TT^+.$$

Felírhatjuk a következőket:

$$i\langle \vec{k}_f | T - T^+ | \vec{k}_i \rangle = \int d\vec{k} \langle \vec{k}_f | T | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | T^+ | \vec{k}_i \rangle$$

$$i[f(\vec{k}_f, \vec{k}_i) - f^*(\vec{k}_i, \vec{k}_f)] = \int d\vec{k} f(\vec{k}_f, \vec{k}) f^*(\vec{k}, \vec{k}_i),$$

akkor

$$-2 \operatorname{Im} f(s, t) = \frac{\sqrt{s}}{2\pi} \int f^*(s, |\vec{k}_f - \vec{k}'|) f(s, |\vec{k}' - \vec{k}_i|) \quad (35)$$

Térjünk vissza a Mandelstam-reprezentációra:

$$f(s, t) = f_B(t) + \int_0^\infty \frac{ds'}{\pi} \int_0^\infty \frac{dt'}{\pi} \frac{q(s', t')}{(s' - s - i\varepsilon)(t' + t)} \quad (36)$$

ahol

$$f_B(t) = - \int_0^\infty d\mu \frac{\sigma(\mu)}{\mu^2 + t}$$

Ha a (36) kifejezést behelyettesítjük (35)-be, az alábbi integrálegyenletet kapjuk $q(s, t)$ -re:

$$\begin{aligned} q(s, t) = & \int d\mu_1 \sigma(\mu_1) \int d\mu_2 \sigma(\mu_2) K(s, t; \mu_1^2, \mu_2^2) - \\ & - 2P \int_0^\infty \frac{ds_1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dt_1}{\pi} \frac{q(s_1, t_1)}{s_1 - s} \int d\mu_2 \sigma(\mu_2) K(s, t; t_1, \mu_2^2) + \\ & + \int_0^\infty \frac{ds_1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dt_1}{\pi} \int_0^\infty \frac{ds_2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dt_2}{\pi} \frac{q(s_1, t_1) q(s_2, t_2)}{[s_1 - s + i\varepsilon][s_2 - s - i\varepsilon]} K(s, t; t_1, t_2) \end{aligned} \quad (37)$$

ahol

$$K(s, t; t_1, t_2) = \frac{\pi}{2} \frac{\theta \left[t - t_1 - t_2 - \frac{t_1 t_2}{2s} - \frac{(t_1 t_2)^{1/2}}{2s} \{16s^2 + 4s(t_1 + t_2) + t_1 t_2\}^{1/2} \right]}{[s \{t - (t_1^{1/2} + t_2^{1/2})^2\} \{t - (t_1^{1/2} - t_2^{1/2})^2\} - t t_1 t_2]^{1/2}} \quad (38)$$

Az integrálegyenlet nemlineáris, ennek ellenére megoldható a λ növekvő hatványai szerinti szukcesszív approximációval. A q súlyfüggvény tehát meghatározható. Ismeretében az $f(s, t)$ szórási amplitúdó megalkotására a (36) képlet szolgál.

Appendix

Néhány megjegyzés az integrálegyenletek elméletéből. A

$$\varphi(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, \xi) \varphi(\xi) d\xi \quad (A1)$$

típusú egyenletet Fredholm-féle integrálegyenletnek nevezzük. Itt $\varphi(x)$ a keresett függvény, $f(x)$, $K(x, \xi)$ a probléma adott függvényei. $K(x, \xi)$ -t az integrálegyenlet magjának nevezzük. Azt kívánjuk meg, hogy a megoldás az $[a, b]$ zárt intervallumban legyen értelmezve.

Megemlítjük, hogy további megállapításaink olyan $K(x, \xi)$ magokra biztosan érvényesek, amelyek eleget tesznek a következő feltételnek: $K(x, \xi)$ folytonos mindkét változójában az $a \leq x \leq b$; $a \leq \xi \leq b$ zárt négyzetben. Ekkor az

$$\int_a^b f(\xi) K(x, \xi) dx$$

függvény folytonos az $[a, b]$ intervallumban.

Volterra megmutatta, hogy (A1) megoldását úgy is megkaphatjuk, hogy az integrálegyenletet egy lineáris egyenletrendszer határeseteként tekintjük.

Ha az $[a, b]$ intervallumot n egyenlő részre osztjuk, akkor a

$$\varphi(x) = f(x) + \lambda \delta \sum_{q=1}^n K(x, x_q) \varphi(x_q) \quad (A2)$$

egyenlet, amelyben $\delta = x_q - x_{q-1}$ és $x_0 = a$, $x_n = b$, az (A1) integrálegyenlethez tart a felosztás finomításakor. Az (A2) egyenletet felírva az osztáspontokra ($x = x_p$; $p = 1, 2, \dots, n$)

$$f(x_p) = -\lambda \delta \sum_{q=1}^n K(x_p, x_q) \varphi(x_q) + \varphi(x_p) \quad (A3)$$

egy n egyenletből álló lineáris inhomogén rendszert kapunk $\varphi(x_q)$ -ra, amelynek megoldhatósági feltétele, hogy determinánsa ne tűnjék el:

$$D_n(\lambda) = \begin{vmatrix} 1 - \lambda \delta K(x_1, x_1) & -\lambda \delta K(x_1, x_2) & \dots & -\lambda \delta K(x_1, x_n) \\ -\lambda \delta K(x_2, x_1) & 1 - \lambda \delta K(x_2, x_2) & \dots & -\lambda \delta K(x_2, x_n) \\ \vdots & & & \\ -\lambda \delta K(x_n, x_1) & & \dots & 1 - \lambda \delta K(x_n, x_n) \end{vmatrix} \neq 0$$

Ha $D_n(\lambda)$ -t sorbafejtjük λ szerint, akkor írhatjuk:

$$D_n(\lambda) = 1 - \lambda \delta \sum_{p=1}^n K(x_p, x_p) + \frac{\lambda^2 \delta^2}{2!} \sum_{p,q=1}^n \begin{vmatrix} K(x_p, x_p) & K(x_p, x_q) \\ K(x_q, x_p) & K(x_q, x_q) \end{vmatrix} - \frac{\lambda^3 \delta^3}{3!} \sum_{p,q,r=1}^n \begin{vmatrix} K(x_p, x_p) & K(x_p, x_q) & K(x_p, x_r) \\ K(x_q, x_p) & K(x_q, x_q) & K(x_q, x_r) \\ K(x_r, x_p) & K(x_r, x_q) & K(x_r, x_r) \end{vmatrix} + \dots; \quad (A4)$$

ha $\delta \rightarrow 0$, akkor

$$D_n(\lambda) \rightarrow D(\lambda) = 1 - \lambda \int_a^b K(\xi_1, \xi_1) d\xi_1 + \\ + \frac{\lambda^2}{2!} \int_a^b \int_a^b \begin{vmatrix} K(\xi_1, \xi_1) & K(\xi_1, \xi_2) \\ K(\xi_2, \xi_1) & K(\xi_2, \xi_2) \end{vmatrix} d\xi_1 d\xi_2 \quad (\text{A5})$$

$D_n(x_\mu, x_\nu)$ -vel jelölve a $K(x_\nu, x_\mu)$ -t tartalmazó taghoz tartozó aldeterminánst, (A3) megoldása a következő:

$$\varphi(x_\mu) = \frac{f(x_1)D_n(x_\mu, x_1) + f(x_2)D_n(x_\mu, x_2) + \dots + f(x_n)D_n(x_\mu, x_n)}{D_n(\lambda)} \quad (\text{A6})$$

Könnyen belátható, hogy a $D_n(x_\mu, x_\nu)$ aldetermináns limesze maga $D(\lambda)$, ha $\delta \rightarrow 0$. $D_n(x_\mu, x_\nu)$ $\mu \neq \nu$ -re a következő alakú:

$$D_n(x_\mu, x_\nu) = \lambda \delta \left\{ K(x_\mu, x_\nu) - \lambda \delta \sum_{p=1}^n \begin{vmatrix} K(x_\mu, x_\nu) & K(x_\mu, x_p) \\ K(x_p, x_\nu) & K(x_p, x_p) \end{vmatrix} + \dots \right\}, \quad (\text{A7})$$

amelyről $\frac{1}{\delta} D_n(x_\mu, x_\nu)$ limesze leolvasható:

$$\frac{1}{\delta} D_n(x_\mu, x_\nu) \rightarrow D(x_\mu, x_\nu, \lambda) = \\ = \lambda K(x_\mu, x_\nu) - \lambda^2 \int_a^b \begin{vmatrix} K(x_\mu, x_\nu) & K(x_\mu, \xi_1) \\ K(\xi_1, x_\nu) & K(\xi_1, \xi_1) \end{vmatrix} d\xi_1 + \dots \quad (\text{A8})$$

Látszik, hogy a felosztás finomításakor az (A6) formula a

$$\varphi(x) = f(x) + \frac{1}{D(\lambda)} \int_a^b D(x, \xi, \lambda) f(\xi) d\xi \quad (\text{A9})$$

képletbe megy át.

A továbbiakban az (A9) kifejezéshez két megjegyzést kell fűzni. Vegyük észre, hogy a megoldás fenti megalkotása inkább szemléletes, és egyáltalán nem precíz eljárással történt. Bebizonyítható azonban, hogy (A9) valóban az (A1) egyenlet megoldása. Másik megjegyzésünk $D(\lambda)$ és $D(x, \xi, \lambda)$ (A5) és (A8) alatti kifejezéseit érinti, amelyek λ hatványai szerint haladó sorok. Ezen sorok konvergenciájáról nem szőttünk, azonban a $K(x, \xi)$ magra tett feltevések mellett a szereplő sorok valóban konvergens [4] tetszőleges λ értékre, sőt $D(x, \xi, \lambda)$ az $a \leq x \leq b$; $a \leq \xi \leq b$ zárt négyzetben egyenletesen konvergens.

Vizsgáljuk meg az (A1) egyenletnek megfelelő homogén egyenlet megoldásának feltételét.

A homogén egyenlet a következő:

$$\varphi(x) = \lambda \int_a^b K(x, \xi) \varphi(\xi) d\xi \quad (\text{A10})$$

Látható, hogy az (A9) képlet azonosan eltűnő φ -függvényt ad, ha $f(x) \equiv 0$, és csupán akkor nem lehet φ -ről (A9) alapján bármit is mondani, ha $D(\lambda) = 0$. Vizsgáljuk tehát az (A10) egyenletet, ha $D(\lambda) = 0$. Azon λ értékeket, amelyekre ez teljesül, sajátértékeknek nevezzük. Legyen λ_0 egy ilyen sajátérték, és multiplicitása legyen m , ami azt jelenti, hogy az (A5) sorfejtést $(\lambda - \lambda_0)$ hatványai szerint átrendezve, az első el nem tűnő tag m -edfokú. Ugyanilyen átrendezést végrehajtva a $D(x, \xi, \lambda)$ -t meghatározó (A8) egyenletben, a kapott sor szerinti multiplicitását jelöljük l -lel ($l \geq 0$). Az (A5) kifejezésekből világos, hogy

$$\int_a^b D(x, x, \lambda) dx = -\lambda \frac{dD(\lambda)}{d\lambda}$$

A két oldal multiplicitását összehasonlítva látható, hogy $l = m - 1$. Másrészt (A1) és (A9) összehasonlítása a következő összefüggést adja:

$$\int_a^b D(x, \xi, \lambda) f(\xi) d\xi = \lambda D(\lambda) \int_a^b K(x, \xi) \varphi(\xi) d\xi$$

Ha a jobb oldalon szereplő $\varphi(\xi)$ helyébe (A9) bal oldalát írjuk, és az egyenlet átrendezése után a szereplő kettős integrálban az integrációs változókat felcseréljük, akkor látható, hogy

$$\int_a^b \left[D(x, \xi, \lambda) - \lambda D(\lambda) K(x, \xi) - \lambda \int_a^b D(\eta, \xi, \lambda) K(x, \eta) d\eta \right] f(\xi) d\xi = 0$$

Ezen utóbbi egyenletnek tetszőleges $f(\xi)$ inhomogenitás függvény mellett fenn kell állnia, ami azt jelenti, hogy

$$D(x, \xi, \lambda) = \lambda D(\lambda) K(x, \xi) + \lambda \int_a^b D(\eta, \xi, \lambda) K(x, \eta) d\eta$$

A multiplicitásokról tett megjegyzésünk értelmében a $g(x, \xi) = \frac{D(x, \xi, \lambda)}{(\lambda - \lambda_0)}$ függvény nem tűnik el, ha $\lambda \rightarrow \lambda_0$, míg ugyanekkor a $\frac{D(\lambda)}{(\lambda - \lambda_0)^l}$ eltűnik, ami azt jelenti, hogy

$$g(x, \xi) = \lambda_0 \int_a^b K(x, \eta) g(\eta, \xi) d\eta,$$

azaz $g(x, \xi)$ tetszőleges ξ érték mellett nem azonosan zérus megoldása az (A10) inhomogén egyenletnek a $\lambda = \lambda_0$ sajátérték mellett.

Megjegyezzük még, hogy ha $\lambda = \lambda_0$, akkor (A1)-nek vagy nincs megoldása, vagy végtelen sok van. Ha a mag valós és szimmetrikus, azaz

$$K(x, \xi) = K(\xi, x),$$

akkor (A1) még rendelkezhetik nem triviális megoldással, de ez csak akkor lehetséges, ha

$$\int_a^b f(x) \varphi_H(x) dx = 0,$$

ahol $\varphi_H(x)$ a homogén egyenlet megoldása.

IRODALOM

- [1] *N. N. Khuri*, Phys. Rev. 107, 1148, 1957.
- [2] *R. Jost, A. Pais*, Phys. Rev. 82, 840, 1951.
- [3] *R. Blankenbecler, M. L. Goldberger, N. N. Khuri, S. B. Treiman*, Ann. Phys. 10, 61, 1960.
- [4] *E. T. Whittaker, G. N. Watson*: A Course of Modern Analysis
- [5] *V. Bargmann*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. 38, 961, 1952.

A KÜSZÖBJELENSÉGEK*

KÖVESY ZSUZSA

Központi Fizikai Kutató Intézet

Bevezetés

Küszöbjelenségek néven foglaljuk össze a hatáskeresztmetszetek energiafüggésének viselkedését azon energiatartományban, ahol valamely eddig zárt reakciócsatorna energetikailag lehetségessé válik. Két — összefüggő — jelenségekört különböztetünk meg:

1. A *küszöbviselkedés* vizsgálata válaszol arra a kérdésre, hogyan változik egy adott reakció hatáskeresztmetszete az energia függvényében a küszöbenergia környékén.

2. A *kereszthatás* egy zárt csatorna megnyílásának következményeit vizsgálja valamely más, egyidejűleg végbemenő reakció hatáskeresztmetszetében. Pontosabban: legyen $\sigma(a \rightarrow a', E)$ az $a \rightarrow a'$ reakció hatáskeresztmetszete az E teljes energia függvényében és váljon energetikailag lehetségessé az $a \rightarrow b$ reakció az $E = Q_b$ energiánál. Kereszthatásnak azt a változást nevezzük, amely a $\sigma(a \rightarrow a', E)$ menetében következik be a Q_b energia környékén annak hatására, hogy az $a \rightarrow b$ átmenet megengedetté vált. A kereszthatás vizsgálatához szükséges a küszöbviselkedés ismerete.

A következőkben a hatáskeresztmetszetek energiafüggésének a küszöbenergiák környezetében fellépő specifikumait két módszerrel elemezzük. Egyrészt bemutatjuk a *Wigner-féle* [1] R-matrix elméletes tárgyalásmódot, másrészt kitérünk *Baznak* [2] a kereszthatás leírására alkalmas módszerére, amely az S-matrix unitaritásán alapul; ez utóbbi kevésbé általános. Már itt megjegyezzük, hogy az R-matrix formalizmus alkalmassága ezen jelenségkör leírására természetes következménye annak, hogy a hatáskeresztmetszetek különleges viselkedését a küszöbenergiák környezetében a Schrödinger-egyenlet megoldásának „külső”-magon kívüli része szabja meg. Az R-matrix elmélet az S-matrixot éppen a külső hullámfüggvényeken és az R-matrixon keresztül fejezi ki, ahol az R-matrix tartalmazza a „magon belüli információkat”. A hatáskeresztmetszetben megjelenő R-matrix elem energiafüggését viszont a küszöb környéki kis energiatartományban általában konstansnak tekinthetjük. Minthogy az R-matrix formalizmust alkalmazzuk, csak olyan reakciókat vizsgálunk, amelyeknél a kezdeti és végállapotban egyaránt két részecske van, azaz feltesszük, hogy azok a reakciócsatornák, amelyekben három, vagy több részecske jelenik meg, zártak.

I. Az S matrix kifejezése a külső hullámfüggvényekkel

Bevezetésként röviden utalunk azokra a fogalmakra és képletekre, amelyeket az R-matrix elméletből a továbbiakban felhasználunk. (L.: részletesen [3]).

Legyen φ a Schrödinger-egyenlet megoldása olyan határfeltételekkel, hogy a küszöb feletti energiákra $r_s \rightarrow \infty$ -nél φ legyen periodikus, a küszöb alatti energiákra

* Hraskó Péternek a III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskolán tartott előadása alapján.

pedig exponenciálisan csökkenő. (Itt s a csatornaindexet, r_s az s csatornában a részecskék relatív távolságát jelöli). A V_{sl} és D_{sl} mennyiségeket a következő összefüggésekkel értelmezzük:

$$\varphi = \sum_{sl} V_{sl} \psi_{sl} \Big|_{r_s=a}, \quad (1)$$

$$\varphi' = \sum_{sl} D_{sl} \frac{2M_s}{\hbar} \psi_{sl} \Big|_{r_s=a}, \quad (2)$$

ahol l a pályamomentum, φ' a φ deriváltja r_s szerint, ψ_{sl} a hullámfüggvény azon része, amely nem tartalmazza a relatív távolságot, és feltesszük, hogy a mag sugarát (a), bármely reakció-csatorna esetén azonosnak választhatjuk. [3]-ban láttuk, hogy

$$V_{sl} = \sum_{s'l'} R_{sl, s'l'} D_{s'l'}, \quad (3)$$

ahol

$$R_{sl, s'l'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda, sl} \cdot \gamma_{\lambda, s'l'}}{E_{\lambda} - E} \quad (4)$$

Az R a reakció-matrix, amely valós és szimmetrikus.

A továbbiakban kifejezzük az S -matrixot az R -matrixon keresztül. Jelöljük a Schrödinger-egyenletet sl csatornára vonatkozó megoldásának kifutó hullámot tartalmazó részét O_{sl} -l, befutó hullámot tartalmazó részét O_{sl}^* -al energetikailag megengedett csatornára. Jelöljük szintén O_{sl} -l az energetikailag zárt csatornában érvényes exponenciálisan csökkenő hullámfüggvényt. A küszöbenergia alatt exponenciálisan csökkenő, a küszöb felett pedig kifutó periodikus hullámfüggvények valóban egy függvényként kezelhetők. Ugyanis, $E = \varepsilon > 0$ -ra a Schrödinger-egyenlet kifutó hullámot tartalmazó része: $O \sim \exp[ikr] = \exp[ir\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar]$. Ha O -t analitikusan folytatjuk a komplex E -síkon és a felső félsíkon haladva egy félkörön áttérünk $(+\varepsilon)$ -ról $(-\varepsilon)$ -ra, akkor $\exp[ikr] \rightarrow \exp[ir\sqrt{2m|\varepsilon|} \exp(i\pi)/\hbar] = \exp[-r\sqrt{2m|\varepsilon|}/\hbar]$, vagyis exponenciálisan csökkenő függvényre jutunk. Más szóval: a $k \rightarrow i|k|$ helyettesítés a pozitív energiájú kifutó hullámból (reakció) negatív energiájú exponenciálisan csökkenő (kötött állapot) függésre vezet [4].

Legyen

$$\varphi = \sum_{sl} \psi_{sl} [\alpha_{sl} O_{sl} + \beta_{sl} O_{sl}^*] \quad (5)$$

a Schrödinger-egyenlet megoldása (1)-nél megadott határfeltétellel. Energetikailag tiltott s -nél $\beta_{sl} = 0$, mert ilyen csatornára a megoldás valós. Definíció szerint

$$V_{sl} = \alpha_{sl} O_{sl} + \beta_{sl} O_{sl}^*, \quad (6)$$

minthogy

$$\varphi' = \sum_{sl} \psi_{sl} (\alpha_{sl}' O_{sl}' + \beta_{sl}' O_{sl}'^*)$$

(2) alapján a

$$D_{sl} = \frac{\hbar}{2M_s} (\alpha_{sl}' O_{sl}' + \beta_{sl}' O_{sl}'^*), \quad (7)$$

ahol M_s a redukált tömeg az s csatornában. Vezessük be a következő mennyiséget:

$$q_{sl} = \frac{2M_s}{\hbar} \cdot \frac{O_{sl}}{O'_{sl}} \quad (8)$$

(6)-ba beírva (8)-at

$$V_{sl} = \frac{\hbar}{2M_s} [\alpha_{sl} q_{sl} O'_{sl} + \beta_{sl} q_{sl}^* O_{sl}^*]. \quad (9)$$

V_{sl} és D_{sl} között az R-matrix teremt kapcsolatot. (7)-t és (9)-t (3)-ba beírva nyerjük, hogy

$$\frac{1}{M_s} [\alpha_{sl} q_{sl} O'_{sl} + \beta_{sl} q_{sl}^* O_{sl}^*] = \sum_{s'l'} R_{sl, s'l'} \frac{1}{M_{s'}} [\alpha_{s'l'} O'_{s'l'} + \beta_{s'l'} O_{s'l'}^*]. \quad (10)$$

Az egyszerűbb írásmód kedvéért vezessünk be matrixokat és vektorokat a következő definíciók segítségével:

$$\begin{aligned} a &\equiv sl, \\ (R)_{aa'} &= R_{aa'}, \\ (O')_{aa'} &= \frac{1}{M_a} O'_a \delta_{aa'}, \\ (q)_{aa'} &= q_a \delta_{aa'}, \\ (\underline{\alpha})_a &= \alpha_a \quad \text{és} \quad (\underline{\beta})_a = \beta_a. \end{aligned} \quad (11)$$

(11) felhasználásával a (10) egyenlet

$$q O' \underline{\alpha} + q^* O'^* \underline{\beta} = R [O' \underline{\alpha} + O'^* \underline{\beta}] \quad (12)$$

alakra hozható, vagy átrendezve

$$(q - R) O' \underline{\alpha} = -(q^* - R) O'^* \underline{\beta},$$

majd

$$\underline{\alpha} = -O'^{-1} (q - R)^{-1} (q^* - R) O'^* \underline{\beta}.$$

Az S-matrixot az

$$\underline{\alpha} = -S \underline{\beta} \quad (14)$$

egyenlőség definiálja. (13)-t és (14)-t összehasonlítva az S-matrix kifejezését kapjuk:

$$S = O'^{-1} (q - R)^{-1} (q^* - R) O'^*. \quad (15)$$

A hatáskeresztmetszetet spinnélküli részecskék reakciójára a

$$\sigma(a \rightarrow b) = \sum_l \sigma^{(l)}(a \rightarrow b) = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |\delta_{ab} - S_{ab}^{(l)}|^2, \quad (16a)$$

általános polarizálatlan esetre a

$$\begin{aligned} \sigma^J(a \rightarrow b) &= \frac{\pi}{k_a^2 (2s+1)} \sum_{l_a l_b} (2J+1) |1 - S_{a l_a, b l_b}^{(J)}|^2, \\ \sigma(a \rightarrow b) &= \sum_J \sigma^J(a \rightarrow b) \end{aligned} \quad (16b)$$

kifejezés adja meg. (16) azonban csak akkor helyes, ha az S -matrix a csatorna-indexekben unitér. Megmutatjuk, hogy az unitaritás teljesülése függ az O_{sl} hullámfüggvények normálásától. Képezzük az (5) hullámfüggvénnyel a teljes radiális áram-sűrűséget

$$J = \sum_{sl} j_{sl} = \sum_{sl} [|\alpha_{sl}|^2 |O_{sl}|^2 v_s - |\beta_{sl}|^2 |O_{sl}^*|^2 v_s] = \\ = \sum_{sl} [|\alpha_{sl}|^2 |O_{sl}|^2 v_s - |\beta_{sl}|^2 |O_{sl}|^2 v_s] = 0,$$

azaz

$$\sum_{sl} |\alpha_{sl}|^2 |O_{sl}|^2 v_s = \sum_{sl} |\beta_{sl}|^2 |O_{sl}|^2 v_s, \quad (17)$$

ahol v_s az s csatornában a relatív sebesség. Ha

$$|O_{sl}| = \frac{d}{\sqrt{v_s}}, \quad (18)$$

ahol d energia független konstans, akkor a (17) összefüggés

$$\sum_{sl} |\alpha_{sl}|^2 = \sum_{sl} |\beta_{sl}|^2 \quad (19)$$

alakú lesz. A (19) viszont éppen az unitaritási feltétel. Látható, hogy ahhoz, hogy a (14)-ben definiált S unitér legyen (ami szükséges ahhoz, hogy a hatáskeresztmetszetet (16a., b.) segítségével számíthassuk) kötelező O_{sl} normálását (18) alakúra választani.

Az S -matrix (15) kifejezésének célszerű alakját kaphatjuk a következő összefüggések felhasználásával:

$$(q-R)^{-1}(q^*-R) = (q-R)^{-1}(q^*-q+q-R) = (q-R)^{-1}(q^*-q) + 1. \quad (20)$$

és

$$(q^*-q)_{sl, sl} = q_{sl}^* - q_{sl} = \frac{2M_s}{\hbar} \left[\frac{O_{sl}^*}{O'_{sl}} - \frac{O_{sl}}{O'_{sl}} \right] = \\ = \frac{2M_s}{\hbar} [O_{sl}^* O'_{sl} - O_{sl} O_{sl}^*] \frac{1}{|O'_{sl}|^2}. \quad (21)$$

Minthogy energetikailag megengedett csatornára

$$O_{sl}^* O'_{sl} - O_{sl} O_{sl}^* = \frac{2iM}{\hbar} (\text{áramsűrűség}) = \frac{2iM_s}{\hbar} \frac{1}{r_s^2}$$

a (21) összefüggést

$$q_{sl}^* - q_{sl} = i \left(\frac{2M_s}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{|O'_{sl}|^2 r_s^2} \quad (22)$$

alakúra hozhatjuk. (15)-be beírva (20)-at és az $r_s = a$ helyen vett (22)-t, az S -matrix-nak a küszöbjelenségek vizsgálata szempontjából legalkalmasabb alakját nyerjük:

$$S = O'^{-1} O'^* - \frac{4i}{(\hbar a)^2} O'^{-1} (R-q)^{-1} O'^{-1}. \quad (23)$$

II. A küszöbviselkedés

Mielőtt a részletes diszkusszióhoz hozzáfekszünk, vezessük be a Wigner-féle szóhasználatot:

A küszöbenergia alatt megengedett részecskéket régi részecskéknak (régii csatornának) vagy p részecskének (p csatornának) nevezzük. A küszöbenergia alatt nem megengedett részecskéket új részecskéknak (új csatornának) vagy n részecskéknak (n csatornának) nevezzük. Vizsgálhatunk $n \rightarrow p$ vagy $p \rightarrow n$ típusú reakciót. Pl.: a magfizikai gyakorlatból jól ismert $n + \alpha \rightarrow T + d$ reakció kb. 14 MeV tömegközépponti energiánál kezdődik, tehát egy endoterm, $p \rightarrow n$ típusú reakció. A megfordítottja: $d + T \rightarrow \alpha + n$ zérus energián kezdődik, amikor az $\alpha + n$ 14 MeV energiával rendelkezik a tömegközépponti rendszerben, tehát egzoterm, $n \rightarrow p$ típusú reakció. A hatáskeresztmetszet küszöbkörnyéki vizsgálata mindig azt jelenti, hogy az n (új) típusú részecskék nagyon kis energiával rendelkeznek.

Foglalkozunk először a reakciókkal, tehát az $n \rightarrow p$, ill. $p \rightarrow n$ típusú átmenetekkel. Ehhez az S -matrix nem diagonális elemeit kell kiszámítani. A (23) képlettel megadott S -matrix kifejezés első tagja zérus járulékot ad (diagonális), míg a második tagban mindig lesz egy p -típusú és egy n -típusú O'^{-1} . Ha az energiát a küszöbenergia környékén változtatjuk, akkor a p -típusú O'^{-1} gyakorlatilag konstansnak tekinthető — nincs semmiféle szinguláris változása. Ha még az $(R - q)^{-1}$ is konstans, akkor a hatáskeresztmetszet viselkedését egyedül az n -típusú O'^{-1} határozza meg. Az $(R - q)^{-1}$ akkor tekinthető konstansnak, ha a küszöbenergia környéki energiatartományban mind az R mind a q matrix elemei közel konstansok. Ezt q -ról alkalmanként belátjuk, $R_{aa'}$ pedig nem függ érzékenyen az energiától, ha a Q távol van az E_λ -tól, azaz valamelyik rezonancia energiától. A küszöbenergia és a rezonancia energia véletlen egybeesése előfordulhat, ekkor R -ben az adott E_λ -hoz tartozó tagot explicit ki kell írni. Ezt az esetet azonban mint tárgyalható, de ritkán előforduló véletlen komplikációt figyelmen kívül hagyjuk. A hatáskeresztmetszet számításához az n típusú O'^{-1} függvényekre lesz szükségünk $k_n a \ll 1$ -nél. Vizsgálatainkat semleges és töltött részecskékkal lejártszódo reakcióra terjesztjük ki, majd utalunk azokra a speciális viszonyokra, ahol az R -matrix formalizmus háromrészecskés reakciónál is alkalmazható.

(1) Folyamatok semleges részecskékkal

A küszöbenergia környezetét a $k_n a \ll 1$ összefüggéssel definiáljuk, ezért az O_n hullámfüggvények sorfejtett alakját használhatjuk. Ezek $l=0$ -ra

$$O_{n0} = \sqrt{\frac{M_n}{\hbar k_n}} \cdot \frac{1}{a} (1 + i a k_n) + O(k_n a)^{3/2}, \quad (24a)$$

$$O'_{n0} = -\sqrt{\frac{M_n}{\hbar k_n}} \frac{1}{a^2} + O(k_n a)^{3/2}, \quad (24b)$$

ebből (8) felhasználásával

$$q_{n0} = -\frac{2M_n a}{\hbar} (1 + i k_n a) \quad (25)$$

és $l > 0$ -ra

$$O_{nl} = \sqrt{\frac{M_n}{\hbar k_n}} \left[\frac{(2l-1)!!}{k_n^l a^{l+1}} + \frac{1}{(2l)!!} k_n^l a^{l-1} \right] + O(ak_n)^{l+\frac{1}{2}}, \quad (26a)$$

$$O'_{nl} = \sqrt{\frac{M_n}{\hbar k_n}} \left[-(l+1) \frac{(2l-1)!!}{k_n^l a^{l+2}} + (l-1) \frac{1}{(2l)!!} k_n^l a^{l-2} \right] + O(ak_n)^{l+\frac{1}{2}}, \quad (26b)$$

ebből

$$q_{nl} = -\frac{2M_n a}{\hbar(l+1)} - \frac{2M_n a}{\hbar(l+1)^2} \cdot \frac{(k_n a)^{2l}}{(2l-1)!} + O(k_n a)^{2l+1}. \quad (27)$$

(25)-t és (27)-t összefoglalva:

$$\text{ahol} \quad \left. \begin{aligned} q_{nl} &= \bar{q}_{nl} + \gamma_l k_n^L, \\ L &= \begin{cases} 1, & \text{ha } l=0 \\ 2l, & \text{ha } l>0 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

és \bar{q}_{nl} és γ_l energiatfüggetlen.

Világos, hogy legalacsonyabb rendben

$$S_{pn}^{(l)} \quad \text{vagy} \quad S_{np}^{(l)} \sim \frac{1}{O'_{nl}} \sim k_n^{l+\frac{1}{2}}. \quad (29)$$

A hatáskeresztmetszet (16a) kifejezésébe (29)-t beírva kapjuk, hogy

$$\sigma^{(l)}(p \rightarrow n) = \frac{\pi}{k_p^2} (2l+1) |S_{pn}^{(l)}|^2 \sim k_n^{2l+1}, \quad (30a)$$

$$\sigma^{(l)}(n \rightarrow p) = \frac{\pi}{k_n^2} (2l+1) |S_{np}^{(l)}|^2 \sim k_n^{2l-1}. \quad (30b)$$

Az $n \rightarrow p$ típusú feladatra klasszikus példa a lassú neutron befogás. Ez a folyamat mindig $l=0$ -nál történik, tehát (30b)-t $l=0$ -nál véve kapjuk, hogy $\sigma^{(0)}(n \rightarrow p) \sim 1/v_n$. Ez a jól ismert $1/v$ törvény. A lassú neutron-befogási hatáskeresztmetszetet a Hughes táblázat [5] szerint 225 izotópra mérték meg és összesen hat esetben találtak észrevehető eltérést az $1/v$ törvénytől. Ezeknél az izotópoknál az $R = \text{konst.}$ feltevés rossz, a küszöbenergia véletlenül nagyon közel van egy E_λ rezonancia nivåhoz.

Röviden vizsgáljuk meg az $n \rightarrow n$ típusú folyamat — rugalmas szórás — hatáskeresztmetszetét. Az S -matrix (23) kifejezéséből látható, hogy az S_{nn} matrix elembe (23)-ból az első tag járulékot ad, ezért

$$\sigma^{(l)}(n \rightarrow n) = \frac{\pi}{k_n^2} |1 - S_{nn}^{(l)}|^2 \approx \frac{1}{k_n^2} \left(\frac{1}{O_{nl}^2} \right)^2 \sim k_n^{4l}. \quad (31)$$

A (31) azt a jól ismert eredményt adja, hogy $\sigma^{(0)}(n \rightarrow n, E=0) = \text{konstans} = 4\pi a^2$.

(2) *Folyamatok töltött részecskéekkel*

A gondolatmenet ebben az esetben is ugyanaz, mint amit semleges részecskéknél alkalmaztunk, azonban az O_{sl} hullámfüggvények lényegesen bonyolultabbak [6]. Minthogy a módszer azonos, de a számítás matematikailag bonyolult, csak a végeredményeket közöljük az I. táblázatban:

I. TÁBLÁZAT

Reakció típus	Taszító elektromos kölcsönhatás	Vonzó elektromos kölcsönhatás
$p \rightarrow n$ endoerg	$\sigma \sim \exp \left[\frac{-2\pi M_n Z_{n1} Z_{n2} e^2}{\hbar} \right]$	$\sigma \sim \text{konstans}$
$n \rightarrow p$ exoerg	$\sigma \sim \frac{1}{k_n^2} \exp \left[-\frac{2\pi M_n Z_{n1} Z_{n2} e^2}{\hbar^2 k_n} \right]$	$\sigma \sim \frac{1}{k_n^2}$

Megjegyezzük, hogy a q_{sl} első közelítésben töltött részeknél is konstans.

(3) *Három részecskére vezető reakciók*

Néhány szóban kitérünk azokra a reakciókra, amelyek annak ellenére, hogy három részecskére vezetnek (pl.: $(n, 2n)$) az R-matrix formalizmussal tárgyalhatók. Az R-matrix elmélet elvileg alkalmatlan a kettőnél több részecskére vezető reakciók vizsgálatára, ugyanis ezeknél a rövid hatótávolságú kölcsönhatás nem korlátozódik a konfigurációs tér egy zárt kis tartományára. Létezik azonban két olyan határeset, ahol ez a nehézség nem lép fel, éspedig ha a kilépő két részecske a csatorna-tartományban nem hat kölcsön, vagy ha a kilépő részecskék közül kettő nagyon erősen kölcsönhat (kvázirészecske).

Az előbbi eset valósul meg $(n \rightarrow 2n)$ reakciónál, ha a két neutron függetlenül párolog el [7]. Az R-matrix elmélet alkalmazható és lényegében az előzőekhez hasonló gondolatmenettel azt kapjuk, hogy ($l=0$ -ra korlátozódva)

$$S_{np}^{(0)} \sim \frac{1}{O'_{n10}} \cdot \frac{1}{O'_{n20}} \sim \sqrt{k_{n1} k_{n2}} \quad (32)$$

ahol k_{n1} és k_{n2} a végállapotbeli két részecskének a harmadikra vonatkozó relatív impulzusa. ($n \rightarrow 2n$ reakciónál nehéz magon a k_{n1} és k_{n2} a kilépő neutronok hullám-száma.) Ennek megfelelően $E_{n1} + E_{n2} = E_p - Q$ és

$$\sigma_{np}^{(0)} \sim \int_0^{E_p - Q} k_{n1} k_{n2} dE_{n1} \sim \int_0^{E_p - Q} [(E_p - Q - E_{n1}) E_{n1}]^{1/2} dE_{n1} \sim (E_p - Q)^2. \quad (33)$$

(Itt Q a második neutron kötési energiája).

A másik határesetnél, amikor is a kilépő részek közül kettő erősen kölcsönhat [8], legyen a kvázirészecske kötési energiája W , kis pozitív érték, nívószélessége $\Gamma \ll W$. Ekkor a gerjesztési függvény $E_p \ll W$ -nél $(E_p - Q)^2$ -tel arányos, $E_p = W$ -nél viszont éles rezonanciát mutat.

Megemlítjük, hogy szintén három részecskére vezet az atomok elektronnal történő ionizációja. A Coulomb kölcsönhatás miatt a feladat igen bonyolult és csak a legutóbbi időben oldották meg [9], és a hatáskeresztmetszetre a

$$\sigma \sim (E_p - Q)^\alpha; \quad \alpha = 1,125$$

eredményt kapták.

III. Kereszthatás

A) Wigner-féle tárgyalás

Tegyük fel, hogy (1) csak két csatornán keresztül mehet végbe a reakció, és pedig a rugalmas szórás- (p -) és a küszöbcsatornán (n), (2) a részecskék nem töltöttek és nincs spinjük. Ezek a feltevések a hatáskeresztmetszet számítását nagymértékben egyszerűsítik anélkül, hogy az általános eset bármely lényeges jellemzőjét eltüntetnék.

A $\sigma(p \rightarrow p)$ hatáskeresztmetszet menetét vizsgáljuk azon energia környezetében, ahol az új csatorna megnyílik. A $\sigma^{(l)}(p \rightarrow p) \sim |1 - S_{pp}^{(l)}|^2$ hatáskeresztmetszet az n csatornára jellemző k_n hullámszámot a q mennyiségen keresztül tartalmazza, minthogy az $S_{pp}^{(l)}$ -ben az $(R - q)$ matrix inverzének hasonló indexű eleme szerepel. Az $(R - q)$ l -ben kvázidiagonális, minden blokk adott l -hez tartozik. Egy ilyen blokk inverzét jelöljük $K^{(l)}$ -l. Figyelembe véve az (1) feltevést

$$(R - q)_l = \begin{pmatrix} R_{pp}^{(l)} - q_{pl} & R_{pn}^{(l)} \\ R_{np}^{(l)} & R_{nn}^{(l)} - q_{nl} \end{pmatrix}$$

és ebből

$$K^{(l)} = \frac{1}{D_l} \begin{pmatrix} R_{nn}^{(l)} - q_{nl} & -R_{np}^{(l)} \\ -R_{pn}^{(l)} & R_{pp}^{(l)} - q_{pl} \end{pmatrix}, \quad (34a)$$

ahol

$$D_l = (R_{pp}^{(l)} - q_{pl})(R_{nn}^{(l)} - q_{nl}) - R_{pn}^{(l)2}. \quad (34b)$$

(23)-ba (34)-et beírva kapjuk, hogy

$$S_{pp}^{(l)} = \frac{O_{pl}^{*'}}{O_{pl}'} - \frac{4i}{\hbar^2 a^2} \frac{M_p^2}{O_{pl}^{'2}} K_{pp}^{(l)}, \quad (35/a)$$

ahol

$$K_{pp}^{(l)} = \frac{1}{D_p} (R_{nn}^{(l)} - q_{nl}). \quad (35b)$$

A küszöbenergia közelében q_{nl} -en kívül minden konstansnak tekinthető. Megjegyezzük, hogy az eddig tárgyalt közelítésben q_{nl} nem függött k_n -től, ezért a kereszthatás csak a következő közelítésben jelenik meg. Helyettesítsük be q_{nl} (28) kifejezését (35b)-be és jelöljük ezentúl a különböző mennyiségek küszöbenergiánál felvett értékét felülvonással. Így kapjuk, hogy a

$$K_{pp}^{(l)} = \bar{K}_{pp}^{(l)} + \frac{R_{nl}^{(l)2}}{\bar{D}_l^2} \gamma_l k_n^L. \quad (36)$$

(35a)-ba behelyettesítve (36)-t nyerjük

$$S_{pp}^{(l)} = \bar{S}_{pp}^{(l)} - i \frac{4M_p^2 \gamma_l}{\hbar^2 a^2} \cdot \frac{R_{np}^{(l)2}}{O_{pl}^{'2} \bar{D}_l^2} k_n^L \quad (37)$$

vagy a k_n^L előtt álló konstansot ε_l -lel jelölve

$$S_{pp}^{(l)} = \bar{S}_{pp}^{(l)} + \varepsilon_l k_n^L. \quad (38)$$

A (38) kifejezésbe k_n^L nem a hullámfüggvény normálási tényezőjén keresztül jutott, hanem az exponensből származik. (A q_{nl} két hullámfüggvény hányadosa, ezért nem függ a normálástól). Ezért felhasználva azt, hogy a küszöb alá $k_n \rightarrow i|k_n|$ helyettesítéssel jutunk:

$$S_{pp}^{(l)} = \bar{S}_{pp}^{(l)} + \begin{cases} \varepsilon_l |k_n|^2, & \text{ha } E_p > Q \\ \varepsilon_l i^l |k_n|^2, & \text{ha } E_p < Q. \end{cases} \quad (39)$$

A (39) kifejezést a (16a)-ba beírva a hatáskeresztmetszetre azt kapjuk, hogy

$$\sigma^{(l)}(p \rightarrow p) = \bar{\sigma}^{(l)}(p \rightarrow p) + \alpha_l (\sqrt{|E_p - Q|})^L. \quad (40)$$

A küszöb alatt és felett általában különböző α_l érvényes.

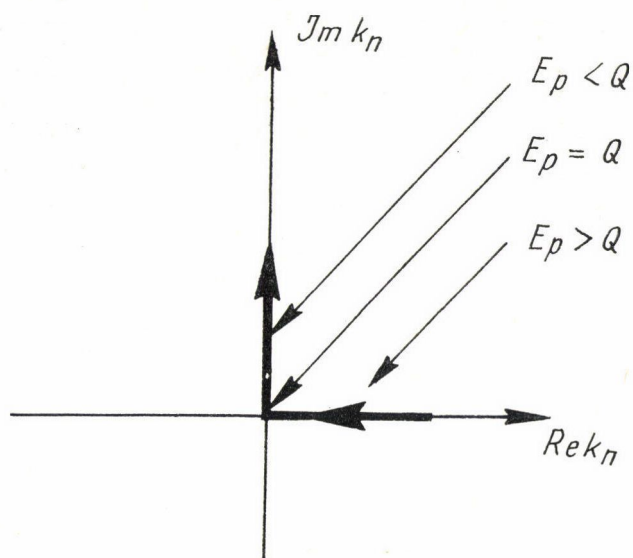
A következőkben arra keresünk választ, hogy $\sigma(p \rightarrow p)$ energiafüggése milyen jellegzetes képet mutat, miközben $E_p < Q$ -ról $E_p > Q$ -ra változtatjuk az energiát. Ehhez első lépésként számítsuk ki a hatáskeresztmetszet E_p szerinti deriváltját a Q energiánál. Ha $l=0$, akkor $L=1$ és

$$\left(\frac{d\sigma^{(0)}(p \rightarrow p)}{dE_p} \right)_{Q \pm 0} = (+ \text{ vagy } -)\infty. \quad (41)$$

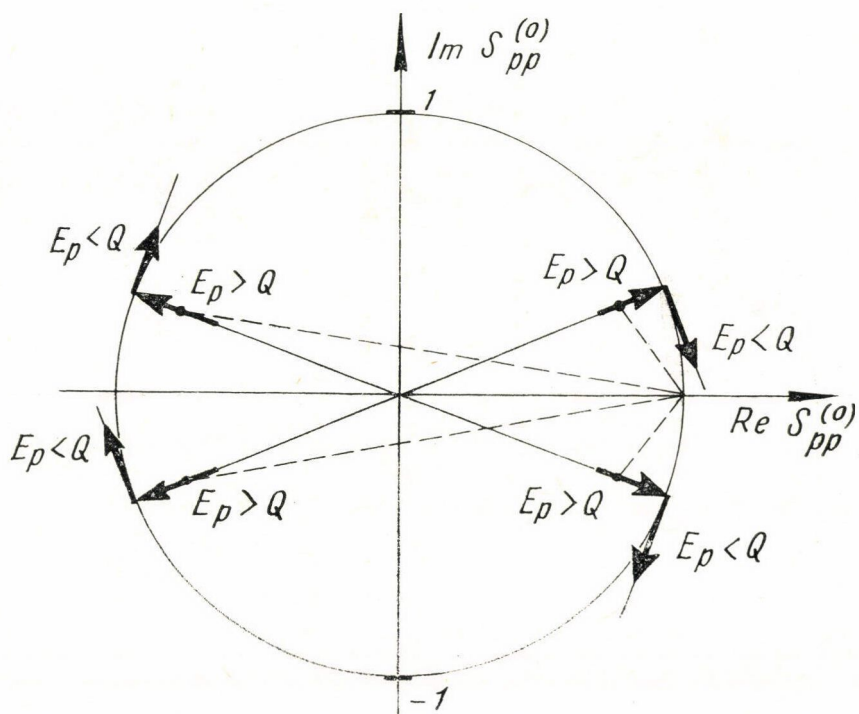
A derivált végtelen, de kétoldali határértéke egyaránt lehet azonos és különböző. Ha $l > 0$, akkor a $\sigma_{(p \rightarrow p)}^{(l)}$ deriváltja zérus. Minthogy a $\sigma = \sum \sigma^{(l)}$, $a(d\sigma/dE_p)$ a küszöb-energiánál végtelen, ha az $l=0$ impulzuszmomentumot a paritásmegmaradás nem tiltja meg. Tegyük fel, hogy az $l=0$ nem tiltott, ekkor a teljes $p \rightarrow p$ hatáskeresztmetszetben az $l=0$ -s „anomális” tag dominál. Megmutatjuk, hogy $E_p = Q + 0$ -nál a derivált csak $(-\infty)$, de $E_p = Q - 0$ -nál $(+)$ és $(-)$ végtelen is lehet. Ehhez (38) alapján írjuk fel $S_{pp}^{(0)}$ -t:

$$S_{pp}^{(0)} = \bar{S}_{pp}^{(0)} + \varepsilon_0 k_n, \quad (42)$$

ahol ε_0 komplex konstans. Az $S_{pp}^{(0)}$ lineáris függvénye k_n -nek, ezért az $S_{pp}^{(0)}$ küszöb környéki változása a komplex síkon — miközben $E_p > Q$ -ról $E_p < Q$ -ra térünk át — olyan, mint az 1. ábrán felrajzolt k_n menete. Az ε_0 -al történő szorzás következtében, a komplex síkon az origó körül forgatást kell végezni, majd az $\bar{S}_{pp}^{(0)}$ komplex szám hozzáadása miatt az origóból megfelelően el kell tolni az $\varepsilon_0 k_n$ pontokat. A megfelelő eltolás azt jelenti, hogy teljesíteni kell $E_p \leq Q$ -ra az $|S_{pp}^{(0)}|^2 = 1$ és $E_p > Q$ -ra az $|S_{pp}^{(0)}|^2 < 1$ feltételeket, amelyek az S-matrix unitaritását fejezik ki esetünkre, amikor a folyamat csak két csatornán keresztül történhet. Ugyanezek a feltételek sugallják — az ε_0 pontos értékének meghatározása nélkül, hogy az ε_0 -val való elforgatás csak a 2. ábrán látható eredményre vezethet. A $\text{Re } \bar{S}_{pp}^{(0)}$ és az $\text{Im } \bar{S}_{pp}^{(0)}$ előjeléről általában nem tudunk semmit, ezért az $\bar{S}_{pp}^{(0)}$ hozzáadása négyféle eredményre vezethet. Az eredményt a 2. ábra mutatja, ahol szaggatott vonallal rajzoltuk be az $(1 - S_{pp}^{(0)})$ -at $E_p > Q$ -ra. A rugalmas szórás hatáskeresztmetszete $|1 - S_{pp}^{(0)}|^2$ -el arányos; a 2. ábrából látszik, hogy ennek értéke mind a négy esetben nő, ha

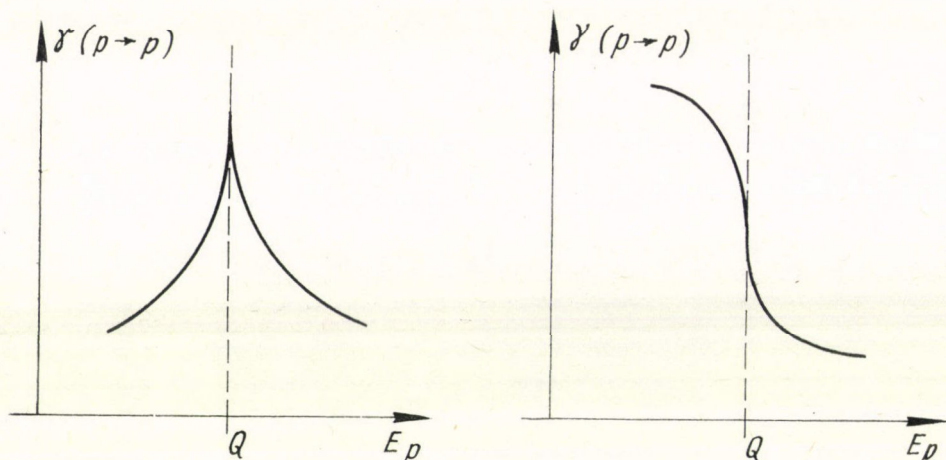


1. ábra



2. ábra

$E_p \rightarrow Q + 0$. (41)-ből pedig tudjuk, hogy a derivált végtelen, ha E_p felülről tart Q -hoz. $E_p < Q$ -nál E_p csökkenésével a hatáskeresztmetszet csökken, ha $\text{Im } \bar{S}_{pp}^{(0)} > 0$ és nő, ha $\text{Im } \bar{S}_{pp}^{(0)} < 0$. Végeredményben a hatáskeresztmetszet a 3. ábrán felrajzolt kétféle anomáliát mutathatja, ha csak $l=0$ megengedett és csak két csatorna van.



3. ábra

(3a) típusú anomáliát „cusp”-nak, a (3b) típusút „rounded step”-nek nevezik. Megjegyezzük, hogy a jelenség meggyőző kísérleti kimutatása hiányzik [10, 11].

B) Baz tárgyalása

Baz [2] azt vette észre, hogy ha ismertnek fogadjuk el a hatáskeresztmetszet menetét a küszöbcsatornában, akkor a keresztthatás más csatornára egyedül az S-matrix unitaritására vonatkozó feltételből számolható. Itt is egy n csatorna hatását vizsgáljuk a rugalmas szórás hatáskeresztmetszetére és ismét csak két csatornán keresztül történhet a reakció.

Az S-matrix unitaritást $E_p > Q$ -nál az

$$|S_{pp}^{(0)}|^2 + |S_{np}^{(0)}|^2 = 1$$

vagy

$$|S_{pp}^{(0)}|^2 = 1 - |S_{np}^{(0)}|^2 \approx \left(1 - \frac{1}{2} |S_{np}^{(0)}|^2\right)^2 \quad (43)$$

egyenlőség fejezi ki.

(43)-ból

$$|S_{pp}^{(0)}| = 1 - \frac{1}{2} |S_{np}^{(0)}|^2,$$

ebből az

$$S_{pp}^{(0)} = \bar{S}_{pp}^{(0)} \left(1 - \frac{1}{2} |S_{np}^{(0)}|^2 \right). \quad (44)$$

Az $S_{np}^{(l)}$ matrix elem energiafüggését a küszöb környékén a (29) képlet adja. Nevezetesen $l=0$ -ra

$$|S_{np}^{(0)}|^2 = \beta' \sqrt{E_p - Q}. \quad (45)$$

(45)-t (44)-be írva nyerjük, hogy

$$S_{pp}^{(0)} = \bar{S}_{pp}^{(0)} \left(1 - \frac{1}{2} \beta' \sqrt{E_p - Q} \right), \quad (46)$$

$E_p < Q$ -ra áttérve

$$S_{pp}^{(0)} = \bar{S}_{pp}^{(0)} \left(1 - \frac{i}{2} \beta \sqrt{|E_p - Q|} \right). \quad (47)$$

Megjegyezzük, hogy a tárgyalt nagyságrendben (a $\sqrt{E_p - Q}$ -nál magasabbrendű tagokat elhagytuk) $E_p < Q$ -nál $|S_{pp}^{(0)}|^2 = 1$. (46), (47)-ből kiindulva minden előzőleg tárgyalt eredményünk megkapható. Kövessük azonban a Baz-féle, a fentiektől némileg különböző utat. Számítsuk ki az $f_{pp}(\theta, E_p)$ szórási amplitúdót

$$f_{pp}(\theta, E_p) = \frac{1}{2ik_p} \sum_l (2l+1) (S_{pp}^{(l)} - 1) P_l(\cos \theta) = \quad (48)$$

$$= \begin{cases} \bar{f}_{pp}(\theta) - \frac{1}{4ik_p} \beta \sqrt{E_p - Q} e^{2i\delta_0}, & \text{ha } E_p > Q \\ \bar{f}_{pp}(\theta) - \frac{1}{4k_p} \beta \sqrt{|E_p - Q|} e^{2i\delta_0}, & \text{ha } E_p < Q, \end{cases}$$

ahol $\bar{S}_{pp}^{(0)} = e^{2i\delta_0}$. Vezessük be még a következő jelölést

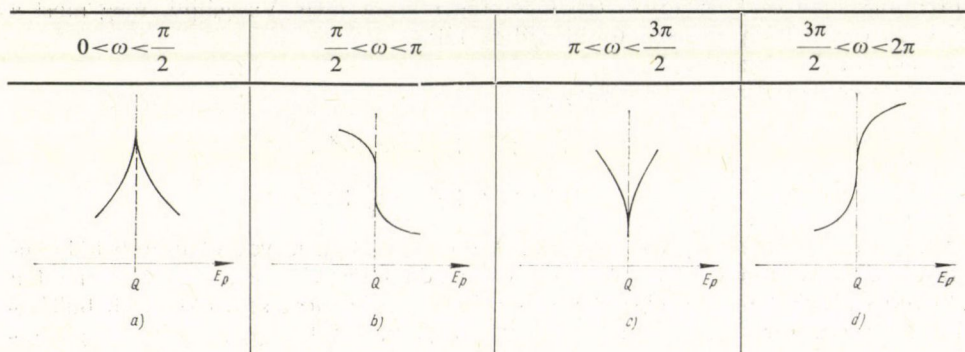
$$\bar{f}_{pp}(\theta) = |\bar{f}_{pp}(\theta)| e^{iz(\theta)}$$

A differenciális hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma(p \rightarrow p, E_p)}{d\Omega} = |f_{pp}(\theta, E_p)|^2 = |\bar{f}_{pp}(\theta)|^2 - \frac{\beta}{2k_p} |\bar{f}_{pp}(\theta)| \sqrt{|E_p - Q|} \begin{cases} \sin(2\delta_0 - \alpha), & \text{ha } E_p > Q, \\ \cos(2\delta_0 - \alpha), & \text{ha } E_p < Q. \end{cases} \quad (49)$$

(49)-ből látható, hogy a differenciális hatáskeresztmetszet küszöbkörnyéki viselkedése (menete) érzékenyen függ attól, hogy a $(2\delta_0 - \alpha)$ milyen értéket vehet fel. A négy különböző esetet a II. táblázaton foglaltuk össze $[\omega = 2\delta_0 - \alpha]$.

II. TÁBLÁZAT



A θ szögre kiintegrálva csak az (a) és (b) típusú viselkedés marad meg. Valóban:

$$\sigma(p \rightarrow p, E_p) = \bar{\sigma}(p \rightarrow p, E_p) - \frac{\beta}{2k_p} \sqrt{|E_p - Q|} \int |\bar{f}_{pp}(\theta)| \left\{ \begin{array}{l} \sin(2\delta_0 - \alpha) \\ \cos(2\delta_0 - \alpha) \end{array} \right\} d\Omega. \quad (50)$$

Foglalkozunk egyelőre az (50)-ben szereplő integrál kiszámításával.

$$\begin{aligned} \int |\bar{f}_{pp}(\theta)| \left\{ \begin{array}{l} \sin(2\delta_0 - \alpha) \\ \cos(2\delta_0 - \alpha) \end{array} \right\} d\Omega &= \frac{-\text{Im}}{\text{Re}} \left[\int \bar{f}_{pp}(\theta) \bar{S}_{pp}^{(0)*} d\Omega \right] = \\ &= \frac{-\text{Im}}{\text{Re}} \left[\frac{\bar{S}_{pp}^{(0)*}}{2ik_p} \int \sum_l (2l+1) (\bar{S}_{pp}^{(l)} - 1) P_l(\cos \theta) d\Omega \right] = \\ &= \frac{-\text{Im}}{\text{Re}} \left[\frac{1 - \bar{S}_{pp}^{(0)*}}{2ik_p} \right] = \frac{-\text{Im}}{\text{Re}} \left[\left[\frac{\bar{S}_{pp}^{(0)} - 1}{2ik_p} \right]^* \right] = \frac{\text{Im}}{\text{Re}} (\bar{f}_{pp}^{(0)}). \end{aligned} \quad (51)$$

(51) felhasználásával az (50) hatáskeresztmetszet értéke:

$$\begin{aligned} \sigma(p \rightarrow p, E_p) &= \\ &= \bar{\sigma}(p \rightarrow p, E_p) - \begin{cases} \frac{\beta}{2k_p} \sqrt{|E_p - Q|} \text{Im} \bar{f}_{pp}^{(0)}, & \text{ha } E_p > Q \\ \frac{\beta}{2k_p} \sqrt{|E_p - Q|} \text{Re} \bar{f}_{pp}^{(0)}, & \text{ha } E_p < Q. \end{cases} \end{aligned} \quad (52)$$

Az $\text{Im} \bar{f}_{pp}^{(0)} = [(1 - \cos \delta_0)/2k_p] > 0$, ezért a hatáskeresztmetszet $E_p > Q$ -nál csak csökkenő lehet, amikor E_p nő; míg a $\text{Re} \bar{f}_{pp}^{(0)} = \sin \delta_0/2k_p$ mind pozitív, mind negatív értéket felvehet, így a hatáskeresztmetszet $E_p < Q$ -nál egyaránt növekedhet és csök-

kenhet. Tehát a II. táblázatban közölt lehetőségek közül a szórási szögre történő integrálás után csak az (a) és (b) lehetőség maradt meg. Vizsgáljuk meg most a tárgyalt eset néhány realiztikusabb változatát:

(1) A spinek szerepe [2].

Legyen két csatorna, és pedig a

$$p: \alpha + A_0; \quad \alpha + A_0 \rightarrow \alpha + A_0,$$

$$n: B_s + n; \quad \alpha + A_0 \rightarrow B_s + n.$$

Az A_0 mag spinje zérus, a B_s magé s . A p csatornában legyen Coulomb kölcsönhatás is. Ez utóbbi nem befolyásolja eddigi eredményeink érvényességét, mert a „kritikus függés” mindig O_n -ből származik, ez pedig most sem Coulomb hullámfüggvény. Az, hogy a végmag spinje nem zérus, arra vezet, hogy a paritás megmaradás nem tilthatja meg az $l_n=0$ lehetőséget. A teljes impulzusmomentum $l_n=0$ -nál

$$J = S \pm \frac{1}{2} = l_p.$$

A két lehetőség közül a páros valósul meg, ha B_s és A_0 paritása azonos és a páratlan ha különböző. A differenciális hatáskeresztmetszetre a fent bemutatott úton a következőt kapjuk a küszöbenergia környezetében:

$$\frac{d\sigma(p \rightarrow p, E_p)}{d\Omega} \sim \quad (53)$$

$$\sim \text{konstans} + \sqrt{|E_p - Q|} \cdot P_{l_p}(\cos \theta) \begin{cases} \sin(2\delta_{l_p} - \alpha); & E_p > Q, \\ \cos(2\delta_{l_p} - \alpha); & E_p < Q. \end{cases}$$

Minthogy a $P_{l_p}(\cos 90^\circ) \neq 0$, ha l_p páros és $P_{l_p}(\cos 90^\circ) = 0$, ha l_p páratlan A_0 és B_s relatív paritása megállapítható abból, hogy $\theta = 90^\circ$ -nál eltűnik-e az anomális viselkedés.

(2) Coulomb taszítás.

Tegyük most fel, hogy az n csatornában a végállapotban Coulomb kölcsönhatás van, és pedig taszítás. A $p \rightarrow p$ hatáskeresztmetszet anomális viselkedését — mint láttuk — az határozza meg, hogy hogyan függ az $|S_{np}|^2$ a k_n -től. Láttuk, hogy amikor Coulomb-erő nem volt az $|S_{np}|^2$ k_n -nel lineárisan változott. Töltés esetén ez arányos lesz $\exp(-(\text{pozitív konstans})/k_n)$ -nel. Az $\exp(-(\text{poz. konst.})/k_n)$ minden hatványnál gyorsabban tart zérushoz $k_n \rightarrow 0$ -nál, ezért várható, hogy az n csatorna megjelenése nem hat a p csatornára. A pontos számítást célszerű a Wigner-féle módszerrel végezni a q meghatározása alapján, és az a várt eredményre vezet. A Coulomb taszítás kvalitatív vizsgálata azonban alkalmat ad arra, hogy megmutassuk a Baz-módszer korlátait. Baz gondolatmenete csak akkor alkalmazható, ha $E_p = Q$ -nál reguláris elágazási pont van, lényegesen szinguláris elágazási pontoknál nem. Jelen példánknál az elágazási pont lényeges szingularitás. Korábban $|S_{pp}|^2 = 1 - ak_n$ volt és ebből négyzetgyököket vonva kaptuk, hogy

$$|S_{pp}| = 1 - \frac{1}{2} c \cdot k_n + \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{3}{2}\right) c^2 k_n^2 \dots, \quad (54)$$

de már a négyzetes tagokat is elhanyagoltuk. Ezt azért tehetjük, mert nemcsak $E_p > Q$ -nál, hanem $E_p < Q$ -nál is elhanyagolhattuk a négyzetes és magasabb rendű tagokat. Ekkor ugyanis k_n átmegey $i|k_n|$ -be. Most $|S_{pp}|^2 = 1 - ce^{\frac{-a}{k_n}}$ és négyzetgyököt vonva

$$|S_{pp}| = 1 - \frac{1}{2!} ce^{-\frac{a}{k_n}} + \frac{1}{2!} \left(\frac{-3}{2} \right) c^2 e^{-\frac{2a}{k_n}} + \dots \quad (55)$$

$E_n > 0$ -nál (amikor k_n valós) a sor tagjai csökkenők, de a $k_n \rightarrow i|k_n|$ helyettesítés után azonos nagyságrendűek. A Wigner tárgyalásnál erre a kritikus gyökvonásra nincs szükség.

(3) Coulomb vonzás.

Elemi rész fizikai alkalmazásnál előfordulhat olyan eset, amikor az n csatorna végállapotbeli részecskéi között Coulomb vonzás van. Ekkor — mint előbb láttuk — $|S_{pp}|^2$ konstans és a Baz-féle gondolatmenet nem alkalmazható, hiszen lényeges szingularitás van. Első pillanatra úgy tűnik, hogy itt az unitaritásnak feltétlenül meg kell sérülnie. Megmutatható [12] az R-matrix elmélet alapján számolva a feladatot, hogy $E_p < Q$ -nál

$$S_{pp} = \frac{1 - \beta \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{|k_n|} \right)}{1 - \beta^* \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{k_n} \right)} e^{2i\delta_0}, \quad (56)$$

ahol $|k_n| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M_n(Q - E_p)}$, β komplex konstans és $\operatorname{Im} \beta > 0$. (56)-ból látszik, hogy $|S_{pp}|^2 = 1$, ha $E_p < Q$. S_{pp} -t folytassuk analitikusan az $E_p > Q$ tartományra. Akkor

$$|k_n| \rightarrow -ik_n = -i \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M_n(E_p - Q)},$$

$$\operatorname{ctg} \frac{\pi}{|k_n|} \rightarrow \operatorname{ctg} \frac{i\pi}{k_n} \rightarrow i \operatorname{ctgh} \frac{\pi}{k_n} = i \left(-1 - 2e^{-\frac{2\pi}{k_n}} + O(\exp(-4\pi/k_n)) \right),$$

ezért $k_n \approx +0$ -nál a $\operatorname{ctg}(\pi/|k_n|) \rightarrow -i$ és

$$S_{pp} = \frac{1 + i\beta}{1 + i\beta^*} e^{2i\delta_0}$$

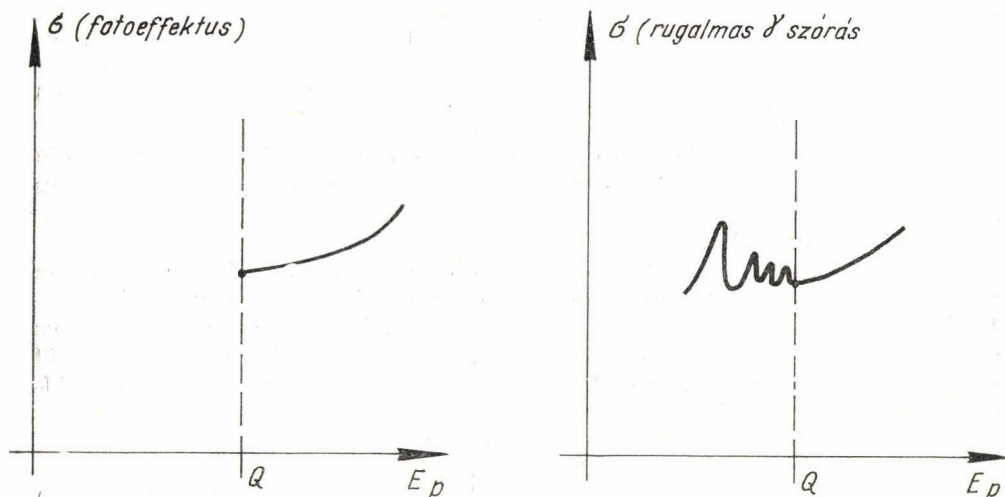
vagy

$$|S_{pp}|^2 = \frac{1 + |\beta|^2 - 2 \operatorname{Im} \beta}{1 + |\beta|^2 + 2 \operatorname{Im} \beta} < 1. \quad (57)$$

(57) miatt az $|S_{pp}|^2 k_n = +0$ -nál lehet véges. Végeredményben

$$\sigma(p \rightarrow p) = \begin{cases} \text{konstans,} & \text{ha } E_p \approx Q + 0, \\ \frac{\pi}{k_p^2} \left| \frac{1 - \beta \operatorname{ctg} \frac{\pi}{|k_n|}}{1 - \beta^* \operatorname{ctg} \frac{\pi}{k_n}} e^{2i\delta_0} \right|^2, & \text{ha } E_p < Q. \end{cases} \quad (58)$$

Az (58) kifejezés $E_p < Q$ -nál szabályos rezonancia szerkezetet mutat. A rezonanciák ott vannak, ahol a $\operatorname{Re} \beta = \operatorname{tg} [\pi/|k_n|]$. Megemlítjük, hogy ez a helyzet a rugalmas γ -szórás hatáskeresztmetszetében a fotoelektromos effektus küszöbenergiájának



4. ábra

környezetében [13]. Noha eddig γ -sugárzást nem tárgyaltunk, eléggé nyilvánvaló, hogy amennyiben a γ -kvantum nem a küszöbcsatornában van, meggondolásaink alkalmazhatók. A 4. ábra mutatja a hatáskeresztmetszetet. Ezt az effektust kísérletileg még nem figyelték meg.

IRODALOM

- [1] E. P. Wigner, Phys. Rev. 73, 1002, 1948.
- [2] A. И. Базь, ЖЭТФ. 33, 923, 1957.
- [3] Györgyi Géza: Magyar Fizikai Folyóirat.
- [4] L. Fonda, Nuovo Cim. 13, 956, 1958.
- [5] D. J. Huges, Pile Neutron Research, New York, 1953.
- [6] G. Breit, Handbuch der Physik, Band 41/1.
- [7] A. M. Laue and R. G. Thomas, Rev. Mod. Phys. 30, 257, 1958.
- [8] A. И. Базь, ЖЭТФ, 40 1511, 1961.
- [9] G. H. Wamier, Phys. Rev. 90, 817, 1953.
- [10] M. E. Eunis and A. Hammendinger, Phys. Rev. 95, 772, 1954.
- [12] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц Квантовая механика, Москва 1963.
- [11] P. R. Malmberg, Phys. Rev. 101, 114, 1956.
- [13] L. Fonda, Nuovo Cim. 20, 116, 1961.

A NUKLEON-ALAKFAKTOROK

HUSZÁR MIKLÓS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

1. A Rosenbluth-formula

A nukleonok szerkezetének tanulmányozásában igen hatékony kísérleti módszert szolgáltat a nagyenergiájú elektronok nukleonokon való szórása. Azt fogjuk megvizsgálni, hogy a differenciális szórási hatáskeresztmetszet milyen nukleonokra vonatkozó információkat foglal magában.

Tekintsük az elektron-proton szórás folyamatát. A proton az elektronnal az elektromágneses tér $A^\mu(x)$ vektorpotenciálján keresztül hat kölcsön, a kölcsönhatási Hamilton-operátor:*

$$H(x) = (j_\mu^{(e)}(x) + j_\mu^{(p)}(x)) A^\mu(x),$$

ahol $j_\mu^{(e)}$ és $j_\mu^{(p)}$ az elektron-, illetve a protonáramot jelöli. Ezzel az S -operátor:

$$S = T e^{-i \int H(x) d^4 x}$$

A bennünket érdeklő folyamatot legalacsonyabb rendben az 1. ábra mutatja. Ennek megfelel az S -operátor kifejtésének

$$S^{(2)} = -i \int d^4 x d^4 y j_\mu^{(e)}(x) D^c(x-y) J^{\mu(p)}(y)$$

tagja, ahol a D^c propagátort a

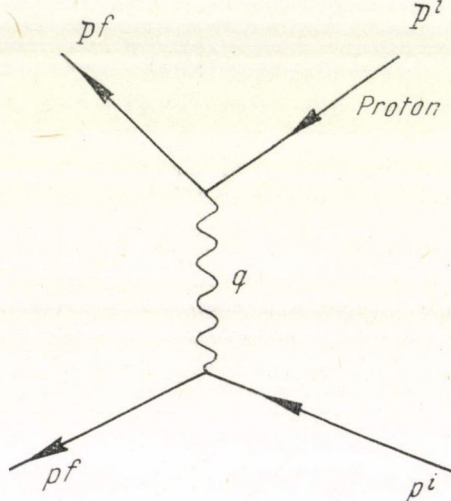
$$D^c(x-y) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 q \frac{e^{-iq(x-y)}}{q^2 + i\epsilon}$$

integrál definiálja [1]. $S^{(2)}$ mátrixeleme határozott impulzusú kezdő és végállapotok között

$$\begin{aligned} \langle \vec{P}^f, \vec{p}^f | S^{(2)} | \vec{P}^i, \vec{p}^i \rangle &= \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^4 x \int d^4 y \langle \vec{P}^f | j_\mu^{(e)}(x) e^{-iqx} | \vec{P}^i \rangle \frac{1}{q^2 + i\epsilon} \times \\ &\times \int d^4 x \langle \vec{P}^f | j^{\mu(p)}(x) e^{iqx} | \vec{P}^i \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

Tételezzük fel ideiglenesen, hogy mind a proton, mind az elektronáram $e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$

* A következő metrikát használjuk: $g^{00} = -g^{11} = -g^{22} = -g^{33} = +1$.



1. ábra. Az $S^{(2)}$ mátrixelem Feynman-diagramja. p az elektron, P a proton impulzusa. Az i és f indexek rendre a kezdő és végállapotra vonatkoznak

alakú. A protonáram mátrixelemére ekkor

$$\int d^4x \langle \vec{P}^f | j^{\mu(p)}(x) e^{iqx} | \vec{P}^i \rangle = 2\pi e \frac{M}{\sqrt{E_f E_i}} \bar{V}^{(+)}(\vec{P}^f) \gamma^\mu V^{(-)}(\vec{P}^i) \delta(P_f - P_i + q) \quad (2)$$

adódik, ahol M a proton tömege, E_i és E_f pedig a kezdő és végállapotban vett energiája, $V^{(\pm)}$ a Dirac-spinorok. Hasonló az elektronáram kifejezése is. Ennek segítségével kiszámíthatjuk a „Dirac-szórás” differenciális hatáskeresztmetszetét:

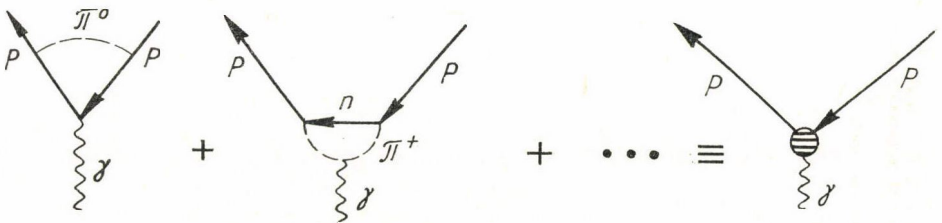
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Dirac}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{N. S.}} \cdot \left(1 + \frac{q^2}{4M^2} \cdot 2 \operatorname{tg}^2 \frac{\Theta}{2} \right),$$

ahol

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{N. S.}} = \frac{e^4}{4E_0^2} \frac{\cos^2 \frac{\Theta}{2}}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}} \frac{1}{1 + \frac{2E_0}{M} \sin^2 \frac{\Theta}{2}},$$

E_0 a bejövő elektron energiája, Θ a szórási szög. (Az N. S. index a spin-nélkülinek vett protontól származó szórás keresztmetszetére utal).

Ez a formula nem írja le helyesen a tapasztalatot. Ennek oka elsősorban az, hogy a proton az erős kölcsönhatásban is részt vesz és így mezonokból álló felhő veszi körül, mely szintén kölcsönhatásba lép az elektromágneses térrel. Többek között ez arra vezet, hogy a proton a Dirac-egyenlet által leírt $e/2M$ mágneses momentumon felül anomális mágneses momentummal rendelkezik. Ezeket az effektusokat elvben úgy vehetnénk figyelembe, hogy az 1. ábrán látható proton-vertex helyett a mezonoktól eredő járulékat is tekintetbe vesszük, azaz a következő gráfokat kellene összegezni:



2. ábra. A proton erős kölcsönhatását leíró folyamatok diagramja

Ahelyett azonban, hogy ezen folyamatok részleteivel foglalkoznánk, meglehetősen általános feltevésekből megkonstruáljuk a (2) alatti protonáram mátrixelemének lehető legáltalánosabb alakját. Ebben két ismeretlen függvény (a formfaktorok) fog maradni, melynek segítségével a hatáskeresztmetszet kifejezhető és kísérletileg kimérhető. Egyes konkrét modellekből számított formfaktorok pedig a tapasztalattal összevethetők.

A szórásfolyamat tárgyalásánál eleve feltételezzük, hogy

- a) a kvantumelektrodinamika helyes,
- b) a több foton kicserélésével járó kölcsönhatás elhanyagolható,
- c) a proton és elektron közti minden direkt (például gyenge) kölcsönhatás elhanyagolható.

Ezek fennállása esetén (1) továbbra is érvényben marad. A fenti feltevések jogosságára visszatérünk. Ezen belül a protonáramról a következő feltevéseket tesszük:

1. Lorentz-kovariáns,
2. Tértükrözéskor rendes vektorként viselkedik,
3. Időtükrözéskor helyesen transzformálódik és hermitikus.

j^μ x -függését a következő alakba írhatjuk: (a p indexet elhagyjuk)

$$j^\mu(x) = e^{iP \cdot x} j^\mu(0) e^{-iP \cdot x}$$

ahol P a négyes impulzusoperátor. Ezzel:

$$\langle \vec{P}^f | j^\mu(x) | \vec{P}^i \rangle = e^{i(P^f - P^i) \cdot x} \langle \vec{P}^f | j^\mu(0) | \vec{P}^i \rangle$$

Ezt az áram mátrixelembe bevezetve kapjuk:

$$\int d^4x \langle \vec{P}^f | j^\mu(x) | \vec{P}^i \rangle = (2\pi) e \frac{M}{\sqrt{E_f E_i}} \bar{V}^{(+)}(\vec{P}^f) O^\mu V^{(-)}(\vec{P}^i) \delta(P_f - P_i + q) \quad (3)$$

ahol O^μ valamilyen 4×4 -es mátrix, mégpedig olyan, hogy $\bar{V} O^\mu V$ vektorként transzformálódjék. (Az előtte álló faktorok bevezetése konvenciószerű, (2)-vel való korrespondencia megtartására szolgál).

A 4×4 -es mátrixok terében teljes rendszert alkot a következő 16 mátrix:

$$1, \gamma^\mu, \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu), \gamma^5, \gamma^\mu \gamma^5$$

O^μ -t ezek szerint fogjuk kifejezni. A tett 2. feltevés értelmében γ^5 és $\gamma^\mu \gamma^5$ elhanyagolható, mert ezek spinorok közé fogva pszeudo-mennyiségekként transzformálódnak. Így ezt kapjuk:

$$O^\mu = a^\mu + b^{\mu\nu} \gamma_\nu + c^{\mu\nu\varrho} \sigma_{\nu\varrho} \quad (4)$$

ahol az a^μ , $b^{\mu\nu}$, $c^{\mu\nu\varrho}$ együtthatók a P^i és P^f impulzusoktól már csak invariánsan függhetnek. Bevezetve

$$P^f + P^i = P, \quad P^f - P^i = q$$

változókat és figyelembe véve, hogy $(P^f)^2 = (P^i)^2 = M^2$ látható, hogy az egyetlen független invariáns mennyiség q^2 . Mivel az együtthatók megalkotására rendelkezésünkre áll két vektor P^μ és q^ν továbbá maga a metrikus tenzor $g^{\mu\nu}$, ezek így írhatók

$$a^\mu = \lambda_1 P^\mu + \lambda_2 q^\mu$$

$$b^{\mu\nu} = \mu_1 g^{\mu\nu} + \mu_2 P^\mu P^\nu + \mu_3 P^\mu q^\nu + \mu_4 q^\mu P^\nu + \mu_5 q^\mu q^\nu \quad (5)$$

$$c^{\mu\nu\varrho} = \nu_1 g^{\mu\nu} q^\varrho + \nu_2 g^{\mu\varrho} P^\nu + \dots$$

ahol λ, μ és ν csak q^2 függvénye. (A ki nem írt tagok értelemszerűen adódnak.) (5)-t visszafírva (4)-be, majd ezt (3) szerint spinorok közé fogva O^μ általános alakját kapjuk. Könnyű belátni azonban, hogy az így adódó tagok a Dirac-egyenlet fennállása miatt egymástól nem függetlenek. Egy példán bemutatjuk, hogy lehet az (5)-ből adódó tagokat egymásra visszavetni. $\bar{V}^{(+)}$ és $V^{(-)}$ kielégítik a Dirac-egyenletet, ezért például

$$\begin{aligned}\bar{V}^{(+)}(\vec{P}^f) q^\mu P^\nu \gamma_\nu V^{(-)}(\vec{P}^i) &= q^\mu \bar{V}^{(+)}(\vec{P}^f) (\hat{P}^f + \hat{P}^i) V^{(-)}(\vec{P}^i) = \\ &= 2q^\mu M \bar{V}^{(+)}(\vec{P}^f) V^{(-)}(\vec{P}^i)\end{aligned}$$

Így a μ_4 -gyel arányos tag λ_2 -vel arányos tagba olvasztható, s. i. t. A lehetséges redukciók elvégzésével végül a következő alakra jutunk:

$$\bar{V}^{(+)} O^\mu V = \bar{V}^{(+)} \left(F_1(q^2) \gamma^\mu + \frac{\kappa}{2M} i F_2(q^2) \sigma^{\mu q} q_q + F_3(q^2) q^\mu \right) V^{(-)} \quad (6)$$

ahol κ a proton anomális momentuma, (amit csak kényelmi szempontból vezettünk be), azaz $\mu_{\text{proton}} = (1 + \kappa) \frac{e}{2M}$.

Kimutatjuk, hogy az időtükrözés invarianciából és a hermitikusságból $F_3(q^2) = 0$ adódik. Legyen T az időtükrözés operátora, akkor az áram definíció szerint így transzformálódik:

$$T j^\mu(0) T^{-1} = g^{\mu\mu} j^\mu(0) \quad (\mu\text{-re nincs összegezés}) \quad (7)$$

Bogoljubov [1] konvencióját használva a keltő és eltüntető operátorok így transzformálódnak:

$$T a_r^{(\pm)}(\vec{p}) T^{-1} = -\eta e^{ir\varphi} a_r^{(\pm)}(-\vec{p}) \quad (8)$$

ahol φ a $\vec{p}/|\vec{p}|$ egységvektor azimutszögét jelenti, $r = \pm 1$ a helicitás operátor sajátértéke, η egységnyi abszolútértékű szám. Felhasználva, hogy T antiunitér, j^μ pedig a feltevés szerint hermitikus, írhatjuk: [2]

$$\langle T(\vec{P}^i, r^i) | T j^\mu(0) | \vec{P}^f, r^f \rangle = \langle \vec{P}^f, r^f | j^\mu(0) | \vec{P}^i, r^i \rangle.$$

Másrészt (7) és (8) szerint a bal oldal így alakítható

$$\begin{aligned}\langle T(\vec{P}^i, r^i) | T j^\mu(0) T^{-1} T | \vec{P}^f, r^f \rangle &= g^{\mu\mu} \langle T(\vec{P}^i, r^i) | j^\mu(0) T | \vec{P}^f, r^f \rangle = \\ &= g^{\mu\mu} e^{i(r_i \varphi_i - r_f \varphi_f)} \langle -\vec{P}^i, r_i | j^\mu(0) | -\vec{P}^f, r^f \rangle\end{aligned}$$

Végül tehát az alábbi összefüggésre jutunk:

$$\langle \vec{P}^f, r^f | j^\mu(0) | \vec{P}^i, r^i \rangle = g^{\mu\mu} e^{i(r_i \varphi_i - r_f \varphi_f)} \langle -\vec{P}^i, r_i | j^\mu(0) | -\vec{P}^f, r^f \rangle$$

Ez utóbbi egyenlet a formfaktorokra az $F_1 = F_1^*$, $F_2 = F_2^*$, $F_3 \equiv 0$ feltételeket rója ki.*

* Felmerülhet, hogy az elektron-proton szórásban az időtükrözés invariancia esetleges sérülését ellenőrizni lehet egy nemeltűnő F_3 alakfaktorból számított hatáskeresztmetszetnek a kísérletekkel való összevetésével. Erre azonban nincs lehetőség, mert F_3 eltűnése az árammegmaradásból is következik.

A levezetés fenti módja azért célszerűbb, mert így egyszersmint F_1 és F_2 valósága is kiadódik.

(6) felhasználásával tehát végül a (3) alatti áram:

$$\int d^4x \langle \vec{P}^f | j^\mu(x) | \vec{P}^i \rangle = (2\pi) e \frac{M}{\sqrt{E_f E_i}} \bar{V}^{(+)}(\vec{P}_f) \left(F_1(q^2) \gamma^\mu + \frac{\kappa}{2M} i F_2(q^2) \sigma^{\mu\nu} q_\nu \right) \times \\ \times V^{(-)}(\vec{P}^i) \delta(P^f - P^i + q) \quad (9)$$

F_1 és F_2 -t rendre Dirac- illetve Pauli-féle formfaktornak nevezzük. Több okból célszerűnek mutatkozott ezek helyett a G_E elektromos és G_M mágneses formfaktor bevezetése a következő definícióval:

$$G_E(q^2) = F_1(q^2) - \frac{q^2}{4M^2} \kappa F_2(q^2) \quad (10)$$

$$\text{és} \quad G_M(q^2) = F_1(q^2) + \kappa F_2(q^2)$$

Felhasználva az áram (9) alatti alakját, az $S^{(2)}$ mátrixelemből az átmeneti valószínűség kiszámítható és végül a Rosenbluthról elnevezett szórás hatáskeresztmetszetére jutunk:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{N.S.}} \left(\frac{G_E^2 + \tau G_M^2}{1 + \tau} + 2\tau G_M^2 \tan^2 \frac{\Theta}{2} \right) \quad (11)$$

ahol

$$\tau = \frac{q^2}{4M^2}$$

Amennyiben proton helyett neutront veszünk a fenti gondolatmenet pontosan elismételhető. A protonra és neutronra vonatkozó formfaktorokat és mágneses momentumokat p és n indexszel különböztetjük meg.

A formfaktorok $q^2=0$ helyen felvett értékei könnyen megkaphatók. Felírjuk ugyanis az áram mátrixelemet arra az esetre, amikor a Dirac-spinorok anomális mágneses momentumot is figyelembe vevő egyenletet elégítenek ki, (ld. [3] 248. oldal). Ekkor a (9) alatti mátrixelemmel azonos szerkezetű kifejezést kapunk, csak F_1 és F_2 helyett konstansok állnak. (Protonnál F_1 és F_2 helyett 1, neutronnál F_1 helyett 0 és F_2 helyett 1.) Megköveteljük, hogy F_1 és F_2 a $q^2=0$ helyen ezen állandókkal legyenek egyenlők. Az így kapott normálás G_E és G_M -mel felírva:

$$G_E^{(n)}(0) = 0 \quad G_E^{(p)}(0) = 1$$

$$G_M^{(n)}(0) = \kappa_n \approx -1,91 \quad G_M^{(p)}(0) = 1 + \kappa_p \approx 2,79.$$

Még megjegyezzük, hogy szokás az izoskalár és izovektor formfaktorokat bevezetni a

$$G^{(S)} = \frac{1}{2} (G^{(p)} + G^{(n)}), \quad G^{(V)} = \frac{1}{2} (G^{(p)} - G^{(n)})$$

definícióval. Ezek rendre a (9)-nek megfelelő izotóptérben felírt nukleonáram izoskalár és izovektor részei mellett álló formfaktorok.

Térjünk ki röviden G_E és G_M szemléletes jelentésére. Nemrelativisztikus kvantummechanikában a formfaktor a térbeli $\varrho(r)$ töltéseloszlás Fourier-transzformáltja.

Jelen esetben azonban nem ilyen egyszerű a helyzet. Sachs és társainak sikerült kimutatni [4], hogy abban a rendszerben, ahol $q^0=0$ kis impulzusátadásra korlátozódva G_E Fourier-transzformáltja a nukleon töltéssűrűségével egyenlő. Hasonló eredmény adódott a nukleon mágneses-momentum eloszlására ilyen értelemben jellemző G_M mágneses formfaktorra.*

Nagy q^2 -re azonban az eljárás elvi korlátok miatt nem vihető keresztül. A szórási folyamata alatt ugyanis a nukleonban részben relativisztikus kinematikai, de főleg dinamikai változások mennek végbe. Teljesen illuzórikus lenne ezek hatását valamiképp átlagolva egy effektív töltéssűrűséget bevezetni. Erre azonban lényegében nincs is szükség, mivel maguk a formfaktorok tartalmazzák a nukleonokra vonatkozó szükséges információkat.

2. Kísérleti igazolás

Térjünk vissza röviden a kiinduláskor tett a), b), c) feltevésekhez. Az elektron-szórás tanulmányozásánál komolyan felmerülhet a kétely a kvantumelektrodinamika érvényességét illetően. Ti. a fenti szórásfolyamat helyes leírására nukleon-formfaktorokat vezettünk be és kizárólag ezeket tettük felelőssé a pontszerű nukleon esetében számolható hatáskeresztmetszettől való eltérésért. Látható, hogy ebben a képből a formfaktor kizárólag a nukleon sajátossága és független attól, hogy elektron, vagy például müönt szórattunk-e. A kísérletek alternatív interpretációja lehetne esetleg, hogy igen nagy impulzusátadás esetén a kvantumelektrodinamika érvényét veszti és az elektron-vertexet is módosítani kell a kvantumelektrodinamikával ellentétes módon. Ebből a célból szórattak müonokat protonon a CERN-ben (ld. [5] 68. old.) és vetették össze az azonos q^2 értéknél mért elektronszórási adatokkal. A mérés azt mutatta, hogy $q^2 \approx 1(\text{GeV}/c)^2$ impulzusátadásig** az elektron és a müonvertex nem különbözik egymástól. A kvantumelektrodinamikával ellentétben álló viselkedést tapasztalt azonban Blumenthal és mások, de ezek a mérések nem eléggé ellenőrzöttek. [5]

A Rosenbluth-formula karakterisztikus sajátossága, hogy $(d\sigma)_R/(d\sigma)_{N.S.} \cdot \tan^2 \frac{\Theta}{2}$ -nek lineáris függvénye. (Ha q^2 értékét lerögzítjük, ezt megvalósíthatjuk különböző bejövő elektronenergiával és szórési szöggel, így ekkor G_E és G_M konstansok). Akár az egyfotonos közelítés nem áll, akár direkt kölcsönhatás lép fel az elektron és proton között a Rosenbluth-egyenestől eltérés kell, hogy mutatkozzék. A mérések szerint $q^2=45f^{-2}$ impulzusátadásig ilyen deviáció nem észlelhető. A mellékelt ábra példaként $q^2=30f^{-2}$ esetén mutatja a mérési pontokat. Részletes analízis [5]-ben Meyer—Berkhout cikkében található.

Megjegyezzük azonban, hogy $25f^{-2} \leq q^2 \leq 35f^{-2}$ esetén 90° -nál kisebb szögekre nem történt kísérleti vizsgálat, továbbá $q^2=40f^{-2}$ és $q^2=45f^{-2}$ -nél a minimális szög 120° volt. Ezt azért érdemes említeni, mert Flamm stb. (lásd [7]) egy közbelső

* Ez csak a G_E és G_M formfaktorokra igaz, F_1 és F_2 -re nem. Ez az egyik ok, amiért $G_{E,M}$ -et érdemes bevezetni. A másik, hogy a Rosenbluth-formulában G_E és G_M szeparálódik, míg F_1 és F_2 használatakor $F_1 F_2$ keresztagok is fellépnek.

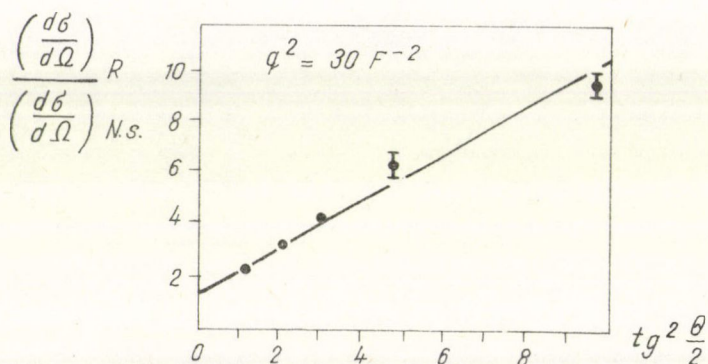
** Gyakran az impulzusátadás négyzetet szokás fermi⁻¹ egységben megadni. Az átszámítás $1(\text{GeV}/c)^2 \approx 25,7 f^{-2}$.

állapot feltételezésével éppen a nem mért kisszögű szórás tartományban jóslott eltérést a Rosenbluth-egyenestől.

Az egyfoton közelítés vizsgálatára más módszer is rendelkezésre áll. Az első a pozitron-proton szórás vizsgálata. Amennyiben kétfotonos kölcsönhatás fellép, az átmeneti valószínűség struktúrája ilyen:

$$W \sim |T|^2 = |e_e e_p T_1 + e_e^2 e_p^2 T_2|^2 = a e_p^2 e_e^2 + b e_p^4 e_e^4 + c e_p^3 e_e^3$$

ahol e_e, e_p az elektron, ill. a proton töltése. Fellép tehát egy e_e^3 -el arányos interferenciát, mely különböző előjelű elektron és pozitron esetén. A mérések azt mutatták, hogy $q^2 \leq 19,5 f^{-2}$ impulzusátadásig ilyen interferencia nem mutatható ki. [8]



3. ábra. A Rosenbluth-egyenest a mérési pontokkal, egy rögzített q^2 értéknél

Belátható, hogy többfotonos kölcsönhatás esetén a visszalökött proton részben polarizált lenne, míg egyfotonos esetben polarizálatlan marad. A mérések szerint $q^2 = 20 f^{-2}$ impulzusátadásig szignifikáns polarizáció nem lép fel. (Lásd [5] 79. old.) Ilymódon a fenti intervallumokban a mérések igazolták az egyfoton közelítések jogosságát.

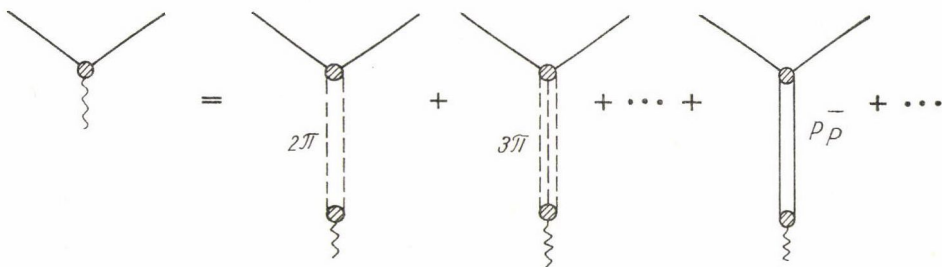
3. Formfaktor modellek

A diszperziós összefüggések módot nyújtanak bizonyos egyszerűsítő feltevések mellett a formfaktorok kiszámítására. A továbbiakban az egyfoton kölcsönhatásra szorítkozunk. Amennyiben $G(t)$, mint a komplex t függvénye $t \rightarrow -\infty$ esetén elég gyorsan eltűnik, rá a következő levonás nélküli diszperziós összefüggés érvényes:

$$G(t) = \frac{1}{\pi} \int_{t_0}^{\infty} \frac{\text{Im } G(t')}{t' - t} dt'$$

$\text{Im } G(t')$ ott különbözik zérustól, ahol $G(t')$ -nek a valós tengely mentén vágása van.

A vágáshoz a különböző közbenső állapotok adnak járulékokat, ezeknek tagonként való figyelembevétele grafikusán így ábrázolható:



4. ábra. A különböző közbenső állapotok járuléka a diszperziós integrálhoz

Ha feltesszük, hogy a rezonanciák $\text{Im } G(t')$ -hez csak a tömegüknek megfelelő m_r érték körüli szűk környezetben szolgáltatnak, járulékokat egy rezonanciát $\text{Im } G(t) \sim \delta(t - m_r^2)$ -el helyettesíthetjük, ahol m_r a rezonancia tömege. Ez a súlyfüggvényben a t hely környezetében

$$G(t) \sim \frac{1}{t - m_r^2}$$

típusú viselkedést ad. A teljes $G(t)$ az elhanyagolások következtében egy lassan változó „background”-függvényt is tartalmazhat, amit konstanssal helyettesítünk. Így kapjuk:

$$G(t) \sim a + \frac{b_1}{t - m_1^2} + \frac{b_2}{t - m_2^2} + \dots$$

Ezt a formfaktor alakot Clementel—Villi típusnak nevezzük [9]. Hofstadter mérései ehhez voltak a legjobban illeszthetők [3]. Ha feltesszük, hogy ilyen járulékokat csak a ρ , ω és φ rezonancia ad, figyelembe véve a formfaktorok normálását, a kísérlettel illesztve a következőt kapjuk: [5]

$$G_E^{(S)} = \frac{2,6}{1 + q^2/15,8} - \frac{3,1}{1 + q^2/26,7} + 1, \quad G_E^{(V)} = \frac{0,9}{1 + q^2/14,5} - 0,4$$

$$G_M^{(S)} = \frac{3,4}{1 + q^2/15,8} - \frac{3,8}{1 + q^2/26,7} + 0,8, \quad G_M^{(V)} = \frac{3,2}{1 + q^2/14,5} - 0,8.$$

Még egy eddig elméletileg meg nem alapozott érdekes, kísérleti eredményt említünk. $G_E^{(p)}$, $G_M^{(p)}/1 + \kappa_p$ és $G_M^{(n)}/\kappa_n$ mennyiségek a mérések szerint egyenlőnek adódtak $q^2 = 50f^{-2}$ impulzusátadásig.

Megjegyzés a korrektúránál. Az azóta történt vizsgálatok megmutatták, hogy a fenti összefüggések levezetéséhez magasabb szimmetriák feltételezése sem elegendő. Az elektromos és mágneses alakfaktorok közti kapcsolat megállapításához dinamikai feltevésekkel kell élni. [11].

IRODALOM

- [1] *Bogoljubov, Shirkov*: Introduction to quantum field theory.
- [2] *Hraskó*: KFKI Közlemények 12, 57, 1964.
- [3] Annual Review of Nuclear Science 7. kötet *Hofstadter* cikke.
- [4] *Ernst, Sachs, Wali*: Phys. Rev. 119, 1105, 1960.
- [5] Proceedings of 1965 easter school for physicists, Geneva, 1965 szept. CERN.
- [6] Bull. Am. Phys. Soc. 10, (series II) 445, 1965.
- [7] *Flamm, Kummer*: Nuovo Cim. 28, 33, 1963.
- [8] *Yount, Pine*: Phys. Rev. 128, 1842, 1963.
- [9] *Clementel, Villi*: Nuovo Cim. 4, 1207, 1956.
- [10] *Drell, Zachariasen*: Electromagnetic Structure of Nucleons, Oxford, 1961.
- [11] Матвеев, Шелест: К вопросу об электромагнитных формфакторах нуклонов и минимальном взаимодействии кварков. ДУБНА preprint, 1966 P-2757

A BORN-KÖZELÍTÉS ÉS FINOMÍTÁSAI*

TELBISZ FERENC

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

I. Born sor

Mint ismeretes, és mint az a Nyári iskolán már többször szerepelt, a szórás-állapotokat a „Lippmann—Schwinger-egyenlet” határozza meg [1]:

$$|\psi^\pm\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi^\pm\rangle, \quad (1)$$

ahol $|\psi^\pm\rangle$ a ki-, ill. befutó szórt hullám, $|\Phi\rangle$ pedig a kölcsönhatásmentes H_0 Hamilton operátor E energiához tartozó sajátállapota.

Az (1) egyenletre, balról alkalmazva az $(E - H_0 \pm i\varepsilon)$ operátort és bevezetve a $H = H_0 + V$ jelölést, átrendezés után az alábbi egyenletet kapjuk:

$$(E - H_0 \pm i\varepsilon) |\psi^\pm\rangle - V |\psi^\pm\rangle = (E - H_0 \pm i\varepsilon) |\Phi\rangle$$

$$(E - H \pm i\varepsilon) |\psi^\pm\rangle = (E - H \pm i\varepsilon) |\Phi\rangle + V |\Phi\rangle.$$

Balról alkalmazva az $(E - H \pm i\varepsilon)^{-1}$ operátort, $|\psi^\pm\rangle$ -ra az alábbi kifejezést kapjuk:

$$|\psi^\pm\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} V |\Phi\rangle = |\Phi\rangle + G^\pm V |\Phi\rangle \quad (2)$$

ahol bevezettük a

$$G^\pm = \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} \quad (3)$$

jelölést.** (2)-t nevezzük a Lippmann—Schwinger egyenlet formális megoldásának. Azért formális, mert G^\pm explicit formáját csak H sajátállapotainak ismeretében tudjuk megadni és mi éppen ezeket szeretnénk meghatározni.

* Györgyi Gézának a III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskolán tartott előadása alapján.

** Megjegyzés: Vegyük észre, hogy csak $\varepsilon \rightarrow 0$ esetben állítható, hogy ψ kielégíti az $(E - H) |\psi^\pm\rangle = 0$ sajátértékegyenletet. Alkalmazva az $(E - H \pm i\varepsilon)$ operátort (2)-re, $(E - H_0) |\Phi\rangle = 0$ felhasználásával kapjuk:

$$(E - H \pm i\varepsilon) |\psi^\pm\rangle = (E - H_0 \pm i\varepsilon) |\Phi\rangle = \pm i\varepsilon |\Phi\rangle$$

$$(E - H) |\psi^\pm\rangle = \mp i\varepsilon (|\psi^\pm\rangle - |\Phi\rangle),$$

ami $\varepsilon \neq 0$ esetén általában zérustól különböző.

Foglalkozunk most a $G^\pm = \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon}$ operátorral. Megmutatjuk, hogy G^\pm hasonló egyenleteknek tesz eleget, mint $|\psi^\pm\rangle$. A (3) egyenletből következik:

$$(E - H \pm i\varepsilon)G^\pm = 1, \quad \text{ill.} \quad G^\pm(E - H \pm i\varepsilon) = 1. \quad (4)$$

Az egyenleteket átrendezve kapjuk:

$$\begin{aligned} (E - H_0 \pm i\varepsilon)G^\pm &= 1 + VG^\pm & G^\pm(E - H_0 \pm i\varepsilon) &= 1 + G^\pm V \\ G^\pm &= \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} (1 + VG^\pm) & G^\pm &= (1 + G^\pm V) \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \\ G^\pm &= G_0^\pm + G_0^\pm VG^\pm & G^\pm &= G_0^\pm + G^\pm VG_0^\pm \end{aligned}$$

ahol a $G_0^\pm = \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}$ jelölést használtuk fel. Az utóbbi egyenletet formálisan megoldva kapjuk

$$G^\pm = \frac{1}{1 - G_0^\pm V} G_0^\pm = G_0^\pm \frac{1}{1 - VG_0^\pm} \quad (5)$$

(5)-nek az iterációs megoldását, (amit úgy is megkaphatunk, hogy formálisan geometriai sorba fejtünk) nevezzük *Born sornak*

$$\begin{aligned} G^\pm &= G_0^\pm + G_0^\pm VG_0^\pm + G_0^\pm VG_0^\pm VG_0^\pm + \dots = \\ &= G_0^\pm \sum_{n=0}^{\infty} (VG_0^\pm)^n = \sum_{n=0}^{\infty} (G_0^\pm V)^n \cdot G_0 \end{aligned} \quad (6)$$

vagy részletesen kiírva

$$\frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} = \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} + \dots$$

(6)-ot felírhatjuk koordinátareprezentációban is.

$$G^\pm(\vec{x}, \vec{x}') = G_0^\pm(\vec{x}, \vec{x}') + \int G_0^\pm(\vec{x}, \vec{x}'') V(\vec{x}'') G_0^\pm(\vec{x}'', \vec{x}') d^3x'' + \dots \quad (7)$$

ahol

$$G_0^\pm(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

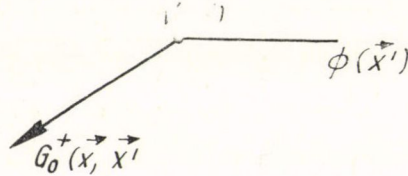
A (2) formális megoldást így is írhatjuk:

$$|\psi^\pm\rangle = (1 + G^\pm V) |\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (G_0^\pm V)^n |\Phi\rangle$$

Ha itt is áttérünk koordinátareprezentációra, az alábbi egyenletet kapjuk:

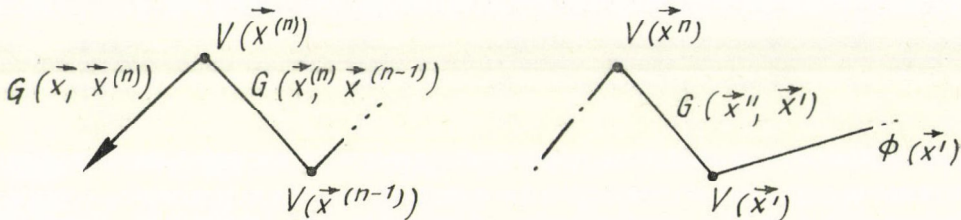
$$\begin{aligned} \psi^\pm(\vec{x}) &= \Phi(\vec{x}) + \int G_0^\pm(\vec{x}, \vec{x}') V(\vec{x}') \Phi(\vec{x}') d^3x' + \\ &+ \iint G_0^\pm(\vec{x}, \vec{x}'') V(\vec{x}'') G_0^\pm(\vec{x}'', \vec{x}') V(\vec{x}') \Phi(\vec{x}') d^3x'' d^3x' + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

A (8) egyenletet szemléltethetjük Feynmann gráfokkal. Az első Born közelítés, ami az $\int G_0^+(\vec{x}, \vec{x}') V(\vec{x}') \Phi(\vec{x}') d^3x'$ -nek felel meg, az alábbi ábrával szemléltethető:



1. ábra

és hasonlóképpen az n -edik Born közelítés:



2. ábra

ami az alábbi integrálnak felel meg:

$$\iint \dots \int G_0^+(\vec{x}, \vec{x}^{(n)}) V(\vec{x}^{(n)}) G_0^+(\vec{x}^{(n)}, \vec{x}^{(n-1)}) \dots V(\vec{x}') \Phi(\vec{x}') d^3x^{(n)} \dots d^3x'$$

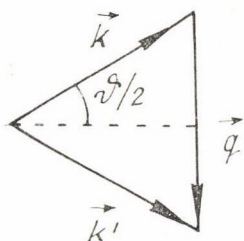
Hasonló szemléltetés kapható impulzusreprezentációban is. Az átmeneti amplitúdóra a következő kifejezést kaphatjuk:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\vec{k}'} | T^\pm | \Phi_{\vec{k}} \rangle &= \langle \Phi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle = \langle \Phi_{\vec{k}'} | V \sum_{n=0}^{\infty} (G_0^\pm V)^n | \Phi_{\vec{k}} \rangle = \\ &= \langle \Phi_{\vec{k}'} | V + V G_0^+ V + V G_0^+ V G_0^+ V + \dots | \Phi_{\vec{k}} \rangle = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \iint \dots \int \langle \Phi_{\vec{k}'} | V | \Phi_{\vec{k}^{(n)}} \rangle \frac{2m}{k^2 - (k^{(n)})^2 \pm i\epsilon} \langle \Phi_{\vec{k}^{(n)}} | V | \Phi_{\vec{k}^{(n-1)}} \rangle \dots \\ &\quad \dots \frac{2m}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon} \langle \Phi_{\vec{k}'} | V | \Phi_{\vec{k}} \rangle d^3k^{(n)} \dots d^3k' \end{aligned}$$

ill. a megfelelő diagram:



3. ábra



4. ábra

Nézzük meg még, hogy az első Born közelítés amplitúdója milyen mérési szögtartományban lesz számottevő. Ekkor az átmeneti mátrix elem

$$\langle \Phi_{\vec{k}'} | V | \Phi_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{y}} V(\vec{y}) d^3 y = \\ \sim \tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}')$$

azaz az átmeneti mátrix elem a V potenciál Fourier transzformáltjával arányos.

Mivel $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{q}$ az impulzus átadás, írhatjuk

$$|q| = |\vec{k}' - \vec{k}| = 2k \sin \vartheta/2$$

(l. 4. ábra)

Ha a potenciál hatótávolsága véges és ezt a véges hatótávolságot a -val jelöljük, akkor a $V(q)$ csak olyan értékekre lesz számottevő, amelyekre $qa \lesssim 1$. q -t kifejezve k -val és $\sin \vartheta/2$ -vel, kapjuk, hogy csak olyan szögekre kapunk számottevő szórási amplitúdót, amire az alábbi feltétel fennáll

$$\frac{\sin \vartheta}{2} \lesssim \frac{1}{2ka}$$

II. Két potenciál

Gyakran előfordul, hogy a V potenciál két tagra bontható:

$$V = U + W,$$

és a $H_u = H_0 + U$ problémát egzaktul meg tudjuk oldani. Alkalmazzuk az alábbi jelölést:

$$H = H_0 + V = H_0 + U + W = H_u + W.$$

Megoldandó az alábbi feladat:

$$(E - H)|\psi\rangle = 0, \quad (\text{II. 1})$$

míg a

$$(E - H_0)|\Phi\rangle = 0 \quad (\text{II. 2})$$

és a

$$(E - H_u)|\chi\rangle = 0 \quad (\text{II. 3})$$

egyenletek megoldása ismeretes.

Feladatunk a

$$\langle \Phi_{\vec{k}'} | T^\pm | \Phi_{\vec{k}} \rangle = \langle \Phi_{\vec{k}'} | U + W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle$$

átmeneti mátrixelem kiszámítása. Felhasználva (I. 1) és (I. 2) egyenleteket, (II. 1) és (II. 3) megoldása formálisan így írható:

$$|\chi_{\vec{k}}^\pm\rangle = |\Phi_{\vec{k}}\rangle + G_U^\pm U |\Phi_{\vec{k}}\rangle, \quad (\text{II. 4})$$

$$|\psi_{\vec{k}}^\pm\rangle = |\chi_{\vec{k}}^\pm\rangle + G_U^\pm W |\psi_{\vec{k}}^\pm\rangle; \quad (\text{II. 5})$$

itt bevezettük a $G_u^\pm = \frac{1}{E - H_u \pm i\varepsilon}$ jelölést. Ezeket a megoldásokat felhasználva, az átmeneti mátrixelem a következő alakú lesz:

$$\begin{aligned}\langle \Phi_{\vec{k}} | T^\pm | \Phi_{\vec{k}} \rangle &= \langle \Phi_{\vec{k}} | U + W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle = \\ &= \langle \Phi_{\vec{k}} | U + W | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \langle \Phi_{\vec{k}} | (U + W) G_U^\pm W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle = \\ &= \langle \Phi_{\vec{k}} | U | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \langle \Phi_{\vec{k}} | W | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \langle \Phi_{\vec{k}} | U G_U^\pm W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \langle \Phi_{\vec{k}} | W G_U^\pm W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle.\end{aligned}$$

Itt a jobb oldal harmadik tagja (II. 4) felhasználásával, a negyedik tag pedig (II. 5) felhasználásával két részre bontható és így kapjuk

$$\begin{aligned}\langle \Phi_{\vec{k}} | T^\pm | \Phi_{\vec{k}} \rangle &= \langle \Phi_{\vec{k}} | U | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \langle \Phi_{\vec{k}} | W | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \\ &+ \langle \chi_{\vec{k}}^\pm | W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle - \langle \Phi_{\vec{k}} | W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \\ &+ \langle \Phi_{\vec{k}} | W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle - \langle \Phi_{\vec{k}} | W | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle = \\ &= \langle \Phi_{\vec{k}} | U | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \langle \chi_{\vec{k}}^\pm | W | \psi_{\vec{k}}^\pm \rangle.\end{aligned}$$

Ha a χ^\pm megoldások ismeretesek, akkor csak a W potenciálban kell sorfejtést alkalmazni. (II. 5)-nek az iteratív megoldása tehát a következő lesz:

$$|\psi_{\vec{k}}^\pm\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (G_U^\pm W)^n |\chi_{\vec{k}}^\pm\rangle$$

és így a

$$\langle \Phi_{\vec{k}} | T^\pm | \Phi_{\vec{k}} \rangle = \langle \Phi_{\vec{k}} | U | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle + \sum_{n=0}^{\infty} \langle \chi_{\vec{k}}^\pm | W (G_U^\pm W)^n | \chi_{\vec{k}}^\pm \rangle$$

kifejezést kapjuk az átmeneti mátrixelemre.

III. Végállapot-kölcsönhatás

Gyakran megtörténik, hogy valamely mag- vagy elemirész-reakcióban keletkező részecskék közül némelyek oly erős kölcsönhatásba lépnek egymással, hogy kölcsönhatásuk számottevően befolyásolja a reakcióhatáskeresztmetszet tulajdonságait. Ezt a kölcsönhatást „végállapot-kölcsönhatásnak” nevezik [2]. A végállapot-kölcsönhatás befolyása jól ismert a magfizikában, ahol pl. a Coulomb-erő fontos szerepet játszik a β -bomlásban. A végállapot-kölcsönhatás figyelembevételét egy példán mutatjuk be [3].

Mivel nincsen neutron-neutron kötött állapot és neutron targetet sem tudunk előállítani, a neutron-neutron erők nem tanulmányozhatók olyan közvetlen módon, mint a neutron-proton és a proton-proton erők. Az olyan folyamatoknál azonban, mint pl. a

$$n + d \rightarrow n + n + p$$

$$\gamma + t \rightarrow n + n + p$$

$$\pi^- + d \rightarrow n + n + \gamma$$

a két neutron közötti végállapot-kölcsönhatás eredményeként módosul a protonok energia spektruma, és ilyen módon közvetett információt kaphatunk a neutron-neutron kölcsönhatásra vonatkozólag.

Vizsgáljuk meg pl. a

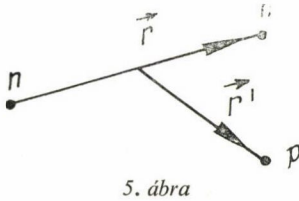
$$\gamma + t \rightarrow n + n + p$$

folyamatot és nézzük meg, hogy hogyan módosul a spektrum a végállapot-kölcsönhatás eredményeként. A neutronok közötti végállapot-kölcsönhatást egy derékszögű potenciálvölgygel írjuk le, aminek sugara d és mélysége V_0 .

A kezdeti állapot hullámfüggvényét az alábbi alakban vesszük fel:

$$\Phi_k = \left(\frac{4\alpha^2}{3\pi^2} \right)^{3/4} e^{-\frac{1}{3}\alpha[(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + (\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + (\vec{r}_3 - \vec{r}_1)^2]}$$

ahol $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$ a két neutron és a proton helyvektorai. Φ_k az alábbi alakban is írható:



ahol

$$\Phi_k = v_k(\vec{r}) \pi_k(\vec{r}')$$

$$v_k(\vec{r}) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\frac{\alpha}{r} r^2}$$

$$\pi_k(\vec{r}') = \left(\frac{4\alpha}{3\pi} \right)^{3/4} e^{-\frac{2\alpha}{3} r'^2}$$

v_k és π_k normalizált függvények, \vec{r} a két neutront összekötő vektor, \vec{r}' pedig a proton helyvektora a két neutron tömegközéppontjára vonatkozólag. (1. 5. ábra).

A kezdeti állapot ilyen megválasztása esetén a mágneses dipól átmenet tiltott és csak elektromos dipól átmenet lehetséges. Ennek hatására a proton p állapotba kerül a neutronok tömegközéppontjára vonatkozólag és így, tekintettel arra, hogy a végállapotban csak a neutronok között tételezünk fel kölcsönhatást, a végállapot hullámfüggvényét a következő alakban írhatjuk fel:

$$\Phi_v = v_v(\vec{r}) \pi_v(\vec{r}')$$

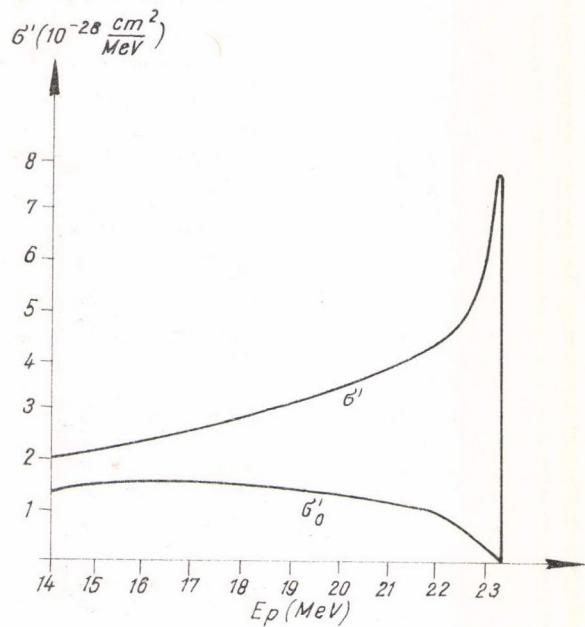
ahol

$$v_v(\vec{r}) = \begin{cases} \left(\frac{1}{2\pi R} \right)^{1/2} \cdot e^{i\delta} \cdot k \frac{\sin(kd + \delta)}{\sin Kd} \cdot \frac{\sin Kr}{kr} & \text{ha } (r \leq d) \\ \left(\frac{1}{2\pi R} \right)^{1/2} \cdot e^{i\delta} \cdot k \frac{\sin(kr + \delta)}{kr} & \text{ha } (r > d) \end{cases}$$

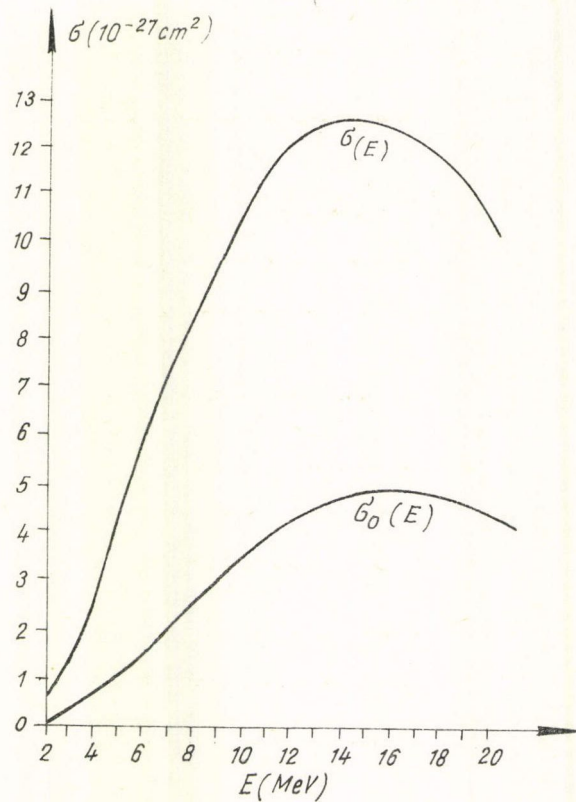
és

$$\pi_v(\vec{r}') = \left(\frac{2}{R'} \right)^{1/2} \cdot k' \left[\frac{\sin k' r'}{(k' r')^2} - \frac{\cos k' r'}{k' r'} \right] Y_{1m}(\vartheta', \varphi')$$

Itt a p állapotban levő protont már szabadnak vettük, míg a neutronok közötti derékszögű potenciálvölgy hatását egzaktul figyelembe vettük, tehát Born közelítést csak az elektromágneses kölcsönhatásra kell végezni.



6. ábra



7. ábra

A neutronok külső (k) és belső (K) hullámszámai között az alábbi összefüggés áll fenn:

$$K^2 = K_0^2 + k^2 \quad \text{ahol} \quad K_0^2 = MV_0/\hbar^2$$

(M a nukleon tömeg.) R és R' a normalizációs gömbök sugara az \vec{r} és \vec{r}' terekben.

Az E_p , $E_p + dE_p$ energia intervallumban keletkező protonok differenciális hatáskeresztmetszetét az alábbi módon írhatjuk fel:

$$\sigma' = \frac{d\sigma}{dE_p} = \frac{(2\pi)^2 \omega}{c} |\mathcal{M}|^2 \varrho(E, E_p),$$

ahol ω a beeső foton frekvenciája, \mathcal{M} a folyamat mátrix eleme és $\varrho(E, E_p)$ a végállapotok száma az $(E, E + dE)$ és $(E_p, E_p + dE_p)$ összes energia ill. proton energia intervallumokban.

Az így kapott differenciális hatáskeresztmetszet a $V_0 = 0$ feltétellel kapott $\sigma'_0 = \frac{d\sigma_0}{dE_p}$ -től csak egy viszonylag egyszerű $F(E, E_p)$ faktorban különbözik. Kiszámítható, hogy

$$\sigma'_0 = \frac{e^2}{\hbar c} \sqrt{24} \frac{\pi}{\alpha} (\varepsilon + \varepsilon_T) \varepsilon_p^{3/2} \left(\varepsilon - \frac{3}{2} \varepsilon_p \right)^{1/2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon_p$$

ahol

$$\varepsilon = ME/(\hbar^2 \alpha) \quad \varepsilon_p = ME_p/(\hbar^2 \alpha) \quad \varepsilon_T = ME_T/(\hbar^2 \alpha)$$

és E_T a triton kötési energiája.

$$F(E, E_p) = \left| \frac{\mu_v}{\mu_v^\circ} \right|^2$$

és itt

$$\mu_v = \int v_v(\vec{r}) v_k(\vec{r}) dr$$

továbbá

$$\mu_v^\circ = \int v_v^\circ(\vec{r}) v_k(\vec{r}) dr$$

$v_v^\circ(\vec{r})$ -al jelöltük a két neutron hullámfüggvényét a végállapot-kölcsönhatás elhanyagolása esetén ($d = V_0 = 0$).

A végállapot-kölcsönhatás szerepét a 6. és 7. ábrákon láthatjuk, ahol feltüntettük σ és σ' értékét $E = 35$ MeV primer energia esetén, valamint a totális hatáskeresztmetszet primer energia függését.

IRODALOM

- [1] R. Hagedorn: The Formal Theory of Scattering, Unpublished Lecture Notes, CERN 63—14.
- [2] K. M. Watson, Phys. Rev. 88, 1163, 1952.
- [3] G. Györgyi és P. Hraskó, Acta Phys. Hung., 17, 253, 1964.

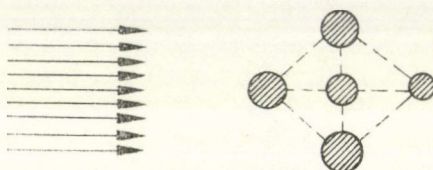
AZ IMPULZUS-KÖZELÍTÉS A SZÓRÁSSZÁMÍTÁSBAN*

BOSCHÁN PÉTER

ELTE Fizikai Intézet

I. Bevezetés

Jelen cikk a többcentrumos szórás alapfeladatával foglalkozik. A bombázó részecskék nyalábja egy N db szórócentrumot (target részecskét) tartalmazó rendszeren szóródik, az egyes szórócentrumok egymással dinamikai kölcsönhatásban állnak.



1. ábra

Célunk a szórás kettős differenciális hatáskeresztmetszetének számítása a bombázó részecske és az egyes szórócentrumok ismertnek feltételezett V_α kölcsönhatásaiból. E probléma alapvető fontosságú a magfizikában, atom és molekulfizikában, szilárd test fizikában egyaránt. Feladatunk a potenciálszórás elmélet legbonyolultabb feladatai közé tartozik, minthogy szorosan kapcsolódik a kvantummechanikai többtestproblémához. Feladatunkat különböző egyszerűsítő feltevések mellett, közelítő módszerek alkalmazásával remélhetjük megoldani.

Egy jól ismert közelítő módszer a *Born-közelítés*, mely a beeső részecske és a target kölcsönhatásának gyengeségét tételezi fel. Egy másik különösen nukleonoknak atommagokon való szóródásának leírásánál bevált módszer az ún. *optikai modell* használata. A beeső részecskéknél a target nukleonokkal való kölcsönhatását ez utóbbiak által kialakított effektív téren való szóródásként írjuk le.

Egy további közelítő módszer az impulzus-approximáció, az optikai modellnek éppen komplementerje. E közelítés használata akkor lehetséges, ha a target részecskék potenciáltere nem nyúlik egymásba. Ilyenkor a sokrészecskén való szóródás problémáját egyrészecske szórásra vezethetjük vissza. A kölcsönhatás pillanatában a target részecskét szabadnak tekintjük. A szóró részecske szórás előtti és utáni állapotát az egész rendszer együtt határozza meg. A szórás előtti és utáni állapotok a target teljes energiaoperátorának sajátállapotai. Nem alkalmazható a módszer, ha a bombázó részecske szabad úthossza a targetben kicsi a target méreteihez képest, hiszen csak egyszeres szórásokat veszünk figyelembe. A továbbiak-

* Kisdi Dávidnak a III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskolán tartott előadása alapján.

ban a fent vázolt impulzus közelítéssel foglalkozunk (II), majd az ehhez kapcsolódó magasabb közelítéseket tárgyaljuk (III). A IV. részben a módszer alkalmazásait mutatjuk be.

II. Impulzus közelítés

Rendszerünk Hamilton-operátora

$$H = \frac{p^2}{2m} + H_t + \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha}(\bar{r} - \bar{r}_{\alpha}), \quad (1)$$

ahol m a bombázó részecske tömege, H_t a target energiaoperátora, V_{α} pedig a bombázó részecskének és a target α -ik részecskéjének kölcsönhatási operátora.

A szabad bombázó részecske állapotait a $|\bar{k}\rangle$ állapotvektorokkal írjuk le. Koordináta reprezentációban

$$|\bar{k}\rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{k}\bar{r}}. \quad (2)$$

A szóródó részecske energiája $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. A target sajátállapotait $\varphi_j(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N)$ -el, energianívóit E_j -vel jelöljük. T operátoros formalizmust használunk. A kettős differenciális hatáskeresztmetszet a T operátor matrix elemével a következőképpen függ össze:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon_f} = \left(\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{k_f}{k_i} |T_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_i + E_i - \varepsilon_f - E_f); \quad (3)$$

itt

$$T_{fi} = \langle \bar{k}_f, \varphi_f | T | \bar{k}_i, \varphi_i \rangle. \quad (4)$$

A T tranzit operátort a következő egyenlet határozza meg

$$T = V + VGT, \quad (5)$$

ahol $V = \sum_{\alpha} V(\bar{r} - \bar{r}_{\alpha})$ és $G = (E - p^2/2m - H_t + i\delta)^{-1}$. (E a rendszer energiája.)

A T operátorra vonatkozó egyenlet formális megoldása

$$T = (1 - VG)^{-1}V, \quad (6)$$

vagy

$$T = \sum_{\alpha} (1 - VG)^{-1} V_{\alpha}. \quad (7)$$

Impulzus közelítés használata esetén az összeg α -ik tagjában a nevezőben a

$$VG \approx V_{\alpha} G_{\alpha}^{\circ} \quad (8)$$

közelítést vezetjük be, ahol

$$G_{\alpha}^{\circ} = (E - p^2/2m - p_{\alpha}^2/2M_{\alpha} + i\delta)^{-1}. \quad (9)$$

Ez felel meg annak, hogy a szóró részecskék potenciáltere nem nyúlik egymásba ($V \approx V_{\alpha}$) és, hogy az ütközés pillanatában a targetrészecskét szabadnak tekintjük ($G \approx G_{\alpha}^{\circ}$). Nyilvánvalóan jól alkalmazható a közelítés lassú neutronok magszóródása esetén (magátmérő $\sim 10^{-13}$ cm, magtávolság $\sim 10^{-8}$ cm.) Diffúznak tekinthetjük pl. a nukleon-deuteron ütközésben a deuteron is, mert a magerők hatósugara $1,4 \cdot 10^{-13}$ cm, a deuteronban a nukleonok távolsága pedig $4,3 \cdot 10^{-13}$ cm.

Impulzus közelítésben tehát a tranzit operátor „egyrészecske tranzit operátorok” összegére bomlik:

$$T^0 = \sum_{\alpha} T_{\alpha}^0 \quad (10)$$

ahol

$$T_{\alpha}^0 = (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1} V_{\alpha} \quad (11)$$

nem más, mint a bombázó részecske és az α -ik target részecske szabad ütközésének tranzit operátora. E két részecske ütközését a

$$\langle \bar{k}_f, \bar{K}_{\alpha f} | T_{\alpha}^0 | \bar{k}_i, \bar{K}_{\alpha i} \rangle = t_{\alpha}(\kappa^2, E) \delta(\bar{k}_i + \bar{K}_{\alpha i} - \bar{k}_f - \bar{K}_{\alpha f}) \quad (12)$$

matrix elemek írják le, ahol $\bar{\kappa} = \bar{k}_f - \bar{k}_i$, az impulzus átadás. A $t_{\alpha}(\kappa^2, E)$ mennyiséget, a V_{α} operátorhoz tartozó tranzit matrixot a következőkben ismertnek tételezzük fel. A T_{α}^0 operátor fenti matrix eleme nem megfelelő számunkra, minthogy a target állapotát nem jellemezhetjük a $\bar{K}_{\alpha i}$, $\bar{K}_{\alpha f}$ impulzusokkal. Ez a target belső szerkezetének végleges semmibevétele volna. A target részecskék közötti dinamikai kölcsönhatást éppen azáltal vesszük figyelembe, hogy a target kezdeti és végállapotát a H_t operátor $\varphi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N)$ sajátfüggvényeivel írjuk le.

A számunkra fontos matrix elemek a $\bar{K} = \{\bar{K}_1, \dots, \bar{K}_N\}$ jelöléssel:

$$\begin{aligned} \langle \bar{k}_f, \varphi_f | T_{\alpha}^0 | \bar{k}_i, \varphi_i \rangle &= \int d^{3N} \bar{K} \cdot d^{3N} \bar{K}' \langle \varphi_f | \bar{K} \rangle \langle \bar{k}_f, \bar{K} | T_{\alpha}^0 | \bar{k}_i, \bar{K}' \rangle \langle \bar{K}' | \varphi_i \rangle = \\ &= \int d^{3N} \bar{K} \cdot d^{3N} \bar{K}' \langle \varphi_f | \bar{K} \rangle t_{\alpha}(\kappa^2, E) \delta(\bar{K}_1 - \bar{K}'_1) \dots \delta(\bar{K}_{\alpha} - \bar{K}'_{\alpha} + \bar{\kappa}) \dots \delta(\bar{K}_N - \bar{K}'_N) \times \\ &\times \langle \bar{K}' | \varphi_i \rangle = t_{\alpha}(\kappa^2, E) \int d^{3N} \bar{K} \langle \varphi_f | \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_{\alpha}, \dots, \bar{K}_N \rangle \langle \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_{\alpha} + \bar{\kappa}, \dots, \bar{K}_N | \varphi_i \rangle = \\ &= t_{\alpha}(\kappa^2, E) \langle \varphi_f | e^{-i\bar{\kappa} \cdot \bar{r}_{\alpha}} | \varphi_i \rangle. \end{aligned}$$

Ezen közelítésben a teljes tranzit operátor matrixeleme pedig

$$T_{fi}^0 = \sum_{\alpha=1}^N t_{\alpha}(\kappa^2, E) \langle \varphi_f(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) | e^{-i\bar{\kappa} \cdot \bar{r}_{\alpha}} | \varphi_i(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) \rangle. \quad (13)$$

III. Magasabb közelítések [1]

A T operátor (7) kifejezését alakítsuk át a következőképpen:

$$T = \sum_{\alpha} (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0 - \{VG - V_{\alpha} G_{\alpha}^0\})^{-1} V_{\alpha}. \quad (14)$$

A nevezőt sorba fejtvé $\{VG - V_{\alpha} G_{\alpha}^0\}$ szerint:

$$T = \sum_{\alpha} (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1} \sum_{S=0}^{\infty} \{(VG - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)(1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1}\}^S V_{\alpha}. \quad (15)$$

A hatványsor 0-ad rendű tagja éppen az impulzus közelítésnek felel meg. A magasabb rendű korrekciókat az $S > 0$ tagok adják. Első rendben

$$\begin{aligned} T^1 &= \sum_{\alpha} (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1} V_{\alpha} (G - G_{\alpha}^0) (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1} V_{\alpha} + \\ &+ \sum_{\alpha \neq \beta} (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1} V_{\beta} G (1 - V_{\alpha} G_{\alpha}^0)^{-1} V_{\alpha}. \end{aligned}$$

Itt az első összegben bevezetjük a (11) alatti T_α° operátort, másrészt a diffúz rendszereknél érvényes $V_\alpha V_\beta \approx 0$ miatt $(1 - V_\alpha G_\alpha^\circ)^{-1} V_\beta \approx V_\beta$, mivel:

$$T^1 = \sum_\alpha T_\alpha^\circ (G - G_\alpha^\circ) T_\alpha^\circ + \sum_{\alpha \neq \beta} V_\beta G T_\alpha^\circ \quad (16)$$

A második tag a szórócentrum és a target többi részének kölcsönhatását veszi figyelembe, az első pedig a kétszeres szórásról ad számot.

IV. Alkalmazások

1. Lassú neutronok szóródása molekulákon [2].

Alkalmazzuk eredményeinket lassú neutronoknak ($\lambda \sim 10^{-8}$ cm, $E \sim 0,1$ eV) molekulákon és szilárd testekben való szóródásának leírására. A target szórócentrumai a targetet alkotó atomok magjai. Elsősorban a bombázó neutron és az α -ik target mag ütközését leíró $t_\alpha(\kappa^2, E)$ mennyiséget kell megállapítanunk. Mag-szórás szempontjából az ütközés $E \sim 0,1$ eV energiája már az $E \rightarrow 0$ határesetnek felel meg, ezért írhatjuk:

$$t_\alpha(\kappa^2, E) = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m_\alpha} \bar{a}_\alpha, \quad (17)$$

ahol \bar{a}_α az α -ik maghoz tartozó neutron szórásihossz, m pedig a neutron és az α -ik mag redukált tömege: $m_\alpha = \frac{mM_\alpha}{m+M_\alpha}$. Legyen $a_\alpha = \left(1 + \frac{m}{M_\alpha}\right) \bar{a}_\alpha$ az ún. kötött atom szórásihossz, ezzel:

$$t_\alpha = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} a_\alpha. \quad (18)$$

Ennek felhasználásával a T_{fi} mátrix elemet impulzusközelítésben a következő alakban írhatjuk

$$T_{fi}^\circ = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \sum_\alpha a_\alpha \langle \varphi_f | e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_\alpha} | \varphi_i \rangle. \quad (19)$$

Mindezideig nem vettünk tudomást a neutronok és a target magok spinjéről. A spin figyelembevétele semmi nehézséget nem jelent, csak tudomásul kell vennünk, hogy a_α a spinváltozókra ható operátor lesz. Mivel a neutron és az atommag kölcsönhatása forgásinvariáns kell, hogy legyen, ezért

$$a_\alpha = a_\alpha^c + a_\alpha^i (\bar{\sigma} \cdot \bar{S}_\alpha), \quad (20)$$

ahol $\bar{\sigma}$ a neutron Pauli operátora, $\bar{S}_\alpha = \bar{I}_\alpha / \sqrt{I_\alpha(I_\alpha + 1)}$ az \bar{I}_α magspinhez tartozó „egységvektor” (ui. $S_\alpha^2 = 1$), továbbá a_α^c a koherens és a_α^i az inkohere szórásihossz. Ezzel

$$T_{fi}^\circ = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \{ \delta_{\kappa_f \kappa_i} \sum_\alpha a_\alpha^c \langle \varphi_f | e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_\alpha} | \varphi_i \rangle + (\kappa_f | \bar{\sigma} | \kappa_i) \sum_\alpha a_\alpha^i \langle \varphi_f | \bar{S}_\alpha e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_\alpha} | \varphi_i \rangle \},$$

ahol χ_i és χ_f a neutron kezdeti és végső spinállapota.

E formula alapvetően fontos a neutronoknak moderátor anyagokban való lelassulásának leírásánál, valamint a lassú neutronokkal végzett anyagszerkezet kutatás elméletében.

A módszer pontosságát a következő példán mutatjuk be. Lassú neutronoknak kémiai kötött protonon való szóródását vizsgáljuk. Ha a molekulát, az egyszerűség kedvéért, végtelen nehézség tekintjük, akkor a feladatot úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a neutronok egy $U(\vec{r}_p)$ potenciáltérben kötött protonon szóródnak. A tranzit mátrix impulzus közelítésben:

$$T_{fi}^0 = \langle \vec{k}_f, \varphi_f | T^0 | \vec{k}_i, \varphi_i \rangle = \frac{\bar{a}\hbar^2}{2\pi^2 m} \langle \varphi_f(\vec{r}_p) | e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_i)\vec{r}_p} | \varphi_i(\vec{r}_p) \rangle,$$

ahol m a nukleontömeg és \bar{a} a neutron-proton szórásihossz. A szórásihossz spin függésével nem foglalkozunk, \bar{a} -t a szinglett szórási hosszal azonosítjuk: $\bar{a} = -23,7 \cdot 10^{-13}$ cm

Az impulzusközelítéshez járuló elsőrendű korrekciót a

$$T^1 = T^0(G - G^0)T^0 \quad (21)$$

operátor mátrix elemei adják. T^0 mátrix elemeit fent már megadtuk, a G operátor mátrix elemei pedig:

$$\langle \vec{k}_f, \varphi_f | G | \vec{k}_i, \varphi_i \rangle = \left(E - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - E_i + i\delta \right) \cdot \delta(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \delta_{if}, \quad (22)$$

ahol E_i a kötött proton energiája a φ_i állapotban, és $\delta_{if} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \varphi_i = \varphi_f \\ 0, & \text{ha } \varphi_i \neq \varphi_f \end{cases}$. Végül a G^0 operátor mátrix elemei

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f, \varphi_f | G^0 | \vec{k}_i, \varphi_i \rangle &= \langle \varphi_f | \left(E - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{p_p^2}{2m} + i\delta \right)^{-1} | \varphi_i \rangle \delta(\vec{k}_i - \vec{k}_f) = \\ &= \int d^3 \vec{K}_p \langle \varphi_f | \vec{K}_p \rangle \left(E - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{\hbar^2 K_p^2}{2m} + i\delta \right)^{-1} \langle \vec{K}_p | \varphi_i \rangle \cdot \delta(\vec{k}_i - \vec{k}_f) = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int \varphi_f^*(\vec{r}_p) \frac{e^{-k_i |\vec{r}_p - \vec{r}_p|}}{|\vec{r}_p - \vec{r}_p|} \varphi_i(\vec{r}_p') d^3 \vec{r}_p d^3 \vec{r}_p' \cdot \delta(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \end{aligned} \quad (23)$$

A T^0 , G és G_0 operátorok mátrix elemeinek ismeretében, a mátrixszorzás szabálya szerint, meghatározhatjuk a T^1 operátor mátrix elemeit. A $T = T^0 + T^1$ operátor mátrix elemeinek ismeretében pedig meghatározhatjuk a szórás hatáskeresztmetszetét.

Vizsgáljuk konkrétan azt az esetet, amikor a proton harmonikus oszcillátor potenciálvölgyben van kötve. Ekkor

$$\varphi_n(\vec{r}_p) = \frac{1}{2} (\pi^{3/2} 2^n n! r_0)^{-1/2} H_n \left(\frac{r_p}{r_0} \right) \frac{e^{-r_p^2/2r_0^2}}{r_p} \quad \text{és} \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad (24)$$

ahol $r_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2}$ és ω az oszcillátorvölgy sajátfrekvenciája. Ezt számszerűleg a ZrH molekula sajátfrekvenciájával megegyező értéknek választjuk: $\hbar\omega = 0,27$ eV. Ezen adatokkal számított neutron szórási hatáskeresztmetszetre $\varepsilon_i = 0,025, 0,27$ és $0,405$ eV bombázó energia mellett a $0 \rightarrow 0, 0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0$ és $1 \rightarrow 1$ molekulaátmenetek esetén a következő értékeket kapjuk

Bombázó energia ε_i	Alapállapot \rightarrow alapállapot σ_{00}	Alapállapot \rightarrow első gerjesztett állapot σ_{01}	Első gerjesztett állapot \rightarrow alapállapot σ_{10}	Első gerjesztett állapot \rightarrow első gerjesztett állapot σ_{11}
0,025 eV	64,8 (0,3%)	0 (0)	43,2 (<0,1%)	52,0 (<0,1%)
0,27 eV	66,4 (0,1%)	0 (0)	14,7 (<0,1%)	18,9 (<0,1%)
0,405 eV	29,6 (0,2%)	6,28 (<0,1%)	13,3 (<0,1%)	18,1 (<0,1%)

A megadott számok az impulzus közelítésben számított hatáskeresztmetszetek barn egységekben, a zárójelben levő számok a T^1 elsőrendű korrekció járulékát adják. Látható, hogy a korrekció sohasem nagyobb három ezreléknél, ami a közelítés rendkívüli pontosságát mutatja.

2. Nukleon-hélium rugalmas szórás [2, 3]. További alkalmazásként vizsgáljuk az $\alpha(n, n)\alpha$ és $\alpha(p, p)\alpha$ rugalmas ütközéseket. A target szórócentrumai az alfa részecske nukleonjai. A nukleon-nukleon szórás t operátora spin és izotópspin függő, a következő alakú:

$$t_\alpha(\kappa^2, E) = \hat{t}_A + \hat{t}_B(\bar{\sigma}_b + \bar{\sigma}_\alpha) \bar{n} + \hat{t}_C(\bar{\sigma}_b \bar{n}) (\bar{\sigma}_\alpha \bar{n}) + \hat{t}_D(\bar{\sigma}_b \bar{p}) (\bar{\sigma}_\alpha \bar{p}) + \hat{t}_E(\bar{\sigma}_b \bar{q}) (\bar{\sigma}_\alpha \bar{q}), \quad (25)$$

ahol $\bar{\sigma}_b$ a bombázó és $\bar{\sigma}_\alpha$ az α -ik target nukleon Pauli operátora és \bar{n} , \bar{p} , \bar{q} a következő egységvektorok

$$\bar{n} = \frac{\bar{k}_i \times \bar{k}_f}{|\bar{k}_i \times \bar{k}_f|}; \quad \bar{p} = \frac{\bar{k}_i - \bar{k}_f}{|\bar{k}_i - \bar{k}_f|}; \quad \bar{q} = \frac{\bar{k}_i + \bar{k}_f}{|\bar{k}_i + \bar{k}_f|}. \quad (26)$$

A $\hat{t}_A, \dots, \hat{t}_E$ mennyiségek izotópspin függőek, pl.

$$\hat{t}_A = t_A(\kappa^2, E) + \hat{t}_A^\times(\kappa^2, E) (\bar{\tau}_b \bar{\tau}_\alpha) \quad (27)$$

és hasonlóan $\hat{t}_B, \dots, \hat{t}_E$. Itt $\bar{\tau}_b$ és $\bar{\tau}_\alpha$ a nukleonok izotópspin vektorai, a $t_A(\kappa^2, E)$ és $\hat{t}_A^\times(\kappa^2, E)$ stb. mennyiségek már egyszerű függvények és függetlenek az α indextől.

Képezzük impulzusközelítésben a tranzit operátor mátrixelemeit

$$T_{fi} = \sum_{\alpha=1}^4 \langle \varphi | t_\alpha(\kappa^2, E) e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_\alpha} | \varphi \rangle \quad (28)$$

ahol $|\varphi\rangle$ az α -részecske (alapállapotának) sajátfüggvénye, t_α fenti kifejezésének behelyettesítésénél figyelembe kell vennünk, hogy az α -rész impulzuszmomentuma $I=0$ és izotópspinje $T=0$. Ebből következik, hogy $\langle \varphi | \bar{\sigma}_\alpha | \varphi \rangle = \langle \varphi | \bar{\tau}_\alpha | \varphi \rangle = 0$. Marad tehát

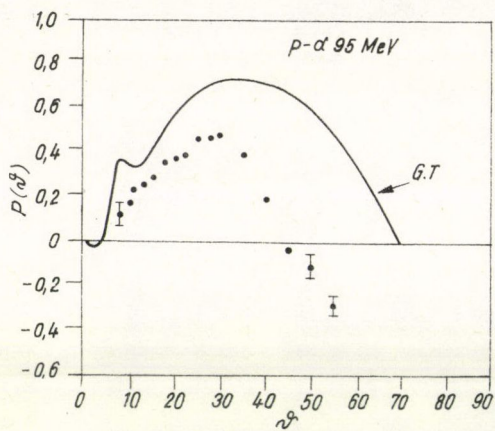
$$T_{fi} = [t_A(\kappa^2, E) + t_B(\kappa^2, E) (\bar{\sigma}_b \bar{n})] F(\vec{\kappa}), \quad (29)$$

ahol

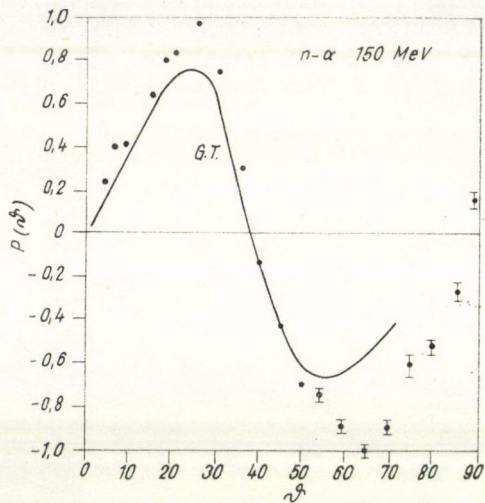
$$F(\vec{\kappa}) = \sum_{\alpha=1}^4 \langle \varphi | e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_\alpha} | \varphi \rangle \quad (30)$$

az alfa-részecske formafaktora. Mivel a t_A és t_B mennyiségek ismeretesek a két-nukleon szórásból, ezért T_{fi} és a nukleon-alfa rész szóráshatáskeresztmetszetének kiszámításához csak az alfa rész formafaktorát kell meghatározni. A magfizikából ismeretes, hogy az alfa rész alapállapotát igen jól leírhatjuk a következő Gauss-típusú függvénnyel

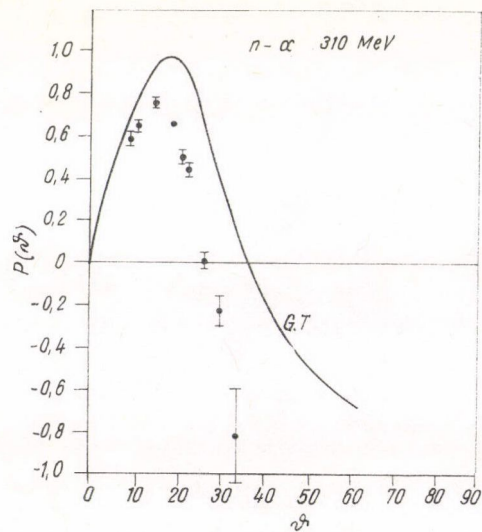
$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = \mathcal{N} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \lambda \sum_{\alpha > \beta = 1}^4 (\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)^2 \right\}, \quad (31)$$



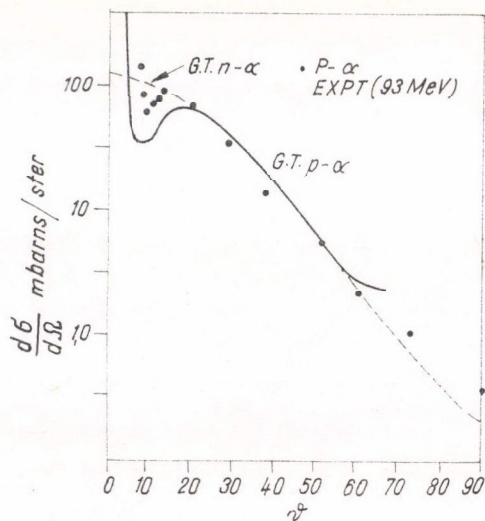
2. ábra



3. ábra



4. ábra

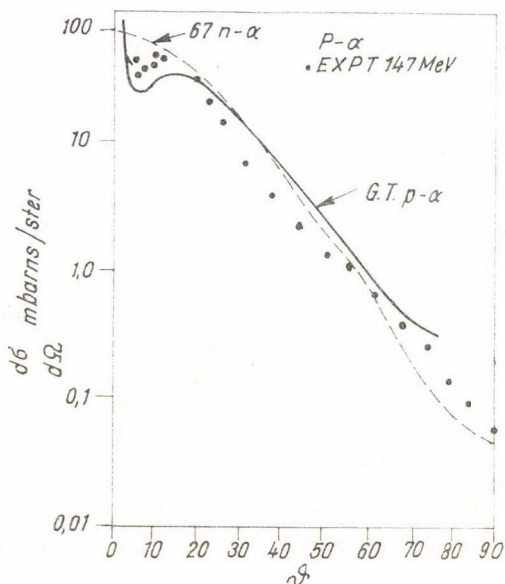


5. ábra

ahol \mathcal{N} normálási állandó és $\lambda = 0,14 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-2}$. E sajátfüggvény felhasználásával a formafaktorra a következő kifejezés adódik:

$$F(\kappa) = 4 \exp \{-3\kappa^2/64\lambda\}. \quad (32)$$

Érdemes megjegyezni, hogy a nukleonok alfa részecskén való szóródásakor polarizálódnak. Ha a beeső nukleon nyáláb polarizálatlan, akkor egyenlő számban tartalmaz $(\bar{\sigma}_0 \bar{n}) = 1$ és $(\bar{\sigma}_0 \bar{n}) = -1$ polarizációjú részecskéket. Az egyik esetben



6. ábra

$T_{fi} = (t_A + t_B)F$ a másik esetben pedig $T_{fi} = (t_A - t_B)F$ lesz. A szórt nukleonok között a kétféle polarizációs állapot tehát nem egyenlően valószínű. A 2.—5. ábrákon bemutatjuk a szórt nukleonok $P = \frac{\sigma_+(9) + \sigma_-(9)}{\sigma_+(9) + \sigma_-(9)}$ polarizációs fokát a szórás szögének függvényében. Megjegyezzük, hogy P nem függ az F formafaktortól. A 6. ábra az $n-\alpha$ és $p-\alpha$ rugalmas ütközés differenciális hatáskeresztmetszetét mutatja 93 MeV és 147 MeV bombázó energia mellett.

IRODALOM

- [1] G. C. Summerfield, Ann. Phys. 26, 72, 1964.
- [2] L. Van Hove, Phys. Rev. 95, 249, 1954.
- [3] L. S. Singh: Nuclear Forces and the Few-Nucleon Problem, Pergamon Press, New York, p. 203.
- [4] Y. Sakamoto, T. Saskawa: Nuclear Forces and the Few-Nucleon Problem, Pergamon Press, New York, p. 213.

A LASSÚ NEUTRONOK SZÓRÓDÁSA KRISTÁLYON ÉS FOLYADÉKON

KOSÁLY GYÖRGY és SOLT GYÖRGY

MTA Központi Fizikai Kutató Intézete, Budapest

TARTALOM

Bevezetés

1. A kétszer differenciális hatáskeresztmetszet, mint a szóró rendszer dinamikájának jellemzője
2. Szórás szabad magon
3. A kristálydinamika alapfogalmai
4. Inkohereus szórás kristályon
5. Inkohereus szórás folyadékon
6. Kohereus szórás kristályon
7. Szórás molekulán

Bevezetés

A kristályok, folyadékok szerkezetét, pontosabban az alkotó atomok átlagos helyzetét nagy pontossággal mérhetjük röntgensugarak diffrakciója segítségével.

Más probléma elé kerülünk azonban akkor, ha az egyes atomok, ionok mozgásának részleteire vagyunk kíváncsiak. A rugalmas tulajdonságok, a fajhő stb. mérése az ilyen mozgások természetéről sok felvilágosítást nyújt (a szabadsági fokok száma, a hang sebessége stb.), de a makroszkopikus paraméterek megismerésénél tovább így nem juthatunk.

A kondenzált anyag mozgásának mikroszkopikus vizsgálatához fontos kísérleti lehetőség a fénynek kristályon történő szórása. Sok értékes információt nyerhetünk így pl. a hatóerők szimmetria-tulajdonságaira vonatkozólag, azonban az atomi mozgások részletei továbbra is rejtve maradnak előttünk.

Ennek oka lényegében a fény és a hang terjedésének más jellegében rejlik, ezért a kondenzált fázisok hang-típusú mozgásai csak néhány esetben mutatkoznak meg közvetlenül a fény szórásakor.

Amilyen ideálisan jó eszköznek bizonyultak a röntgensugarak a szerkezetvizsgálatoknál, ugyanolyan alkalmasnak látszik a termikus ($E \sim 25$ meV) és hideg ($E \leq 5$ meV), röviden lassú neutronok szórása a kondenzált anyag mikrodinamikájának tanulmányozására. A következőkben azt a kérdést fogjuk tárgyalni, hogy hogyan lehet neutron-szórás kísérletekből az összefüggő anyag belső dinamikájára visszakövetkeztetni. A tárgyalás során igyekezni fogunk a neutronfizikai vizsgálati módszereket más módszerekkel (látható fény szórása, infravörös spektroszkópia stb.) összevetni. Ahol nagyobb kitérők nélkül lehetséges, ott felhívjuk a figyelmet a Mössbauer-effektuson alapuló vizsgálatok elméletével való összefüggésekre.

1. A kétszer differenciális hatáskeresztmetszet, mint a szóró rendszer dinamikájának jellemzője

Szóródjék valamely N részecskéből álló rendszeren egy $\hbar k_0$ impulzusú, polarizálatlan neutronnyaláb és az analizáló berendezés észlelje a $\hbar k$ impulzusú neutronokat polarizációra való tekintet nélkül.

Kiinduló pontunk a Fermi-féle pseudopotenciál elmélet lesz [1]. Felírjuk ebben a közelítésben annak hatáskeresztmetszetét, hogy a szóró rendszer (kristály, folyadék vagy gáz) a szórási folyamat következtében az $\{i\}$ kvantumszámokkal jellemzett állapotból az $\{f\}$ kvantumszámokkal jellemzett állapotba kerül, miközben a neutron spinkvantumszáma m_i -ről m_f -re, impulzusa pedig $\hbar\mathbf{k}_0$ -ról $\hbar\mathbf{k}$ -ra változik. A formula egységnyi neutron-vége energiára és egységnyi térszögre vonatkozik.

$$\frac{d^2\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{k}_0, m_i \rightarrow f, \mathbf{k}, m_f)}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \delta(E_i - E_f - \varepsilon) \cdot \sum_{v, \mu} \langle i | \langle m_i | a_v e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_v} | m_f \rangle | f \rangle \langle f | \langle m_f | a_\mu e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\mu} | m_i \rangle | i \rangle \quad (1.1)$$

ahol

$$\varepsilon = E - E_0; \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad (m \text{ a neutron tömege})$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \quad a_v = A_v + 2C_v S_v s$$

és S_v a γ -dik mag, s a neutron spin-operátora, A_v és C_v a v -edik mag koherens ill. inkohereus szórási amplitúdói [1].

(1.1) természetesen csak abban az esetben érvényes, ha a szórás magfizikai értelemben rugalmas.

Az elmélet felépítésénél egy olyan kísérleti berendezést tartunk szem előtt, amely kizárólag a neutron energiáját és szögeloszlását méri, az összes többi kezdeti kvantumszámra átlagolni, a végállapot kvantumszámaira összegezni kell. Foglalkozunk először a neutron m_i , m_f spin-kvantumszámaival. Felhasználva a Pauli-operátorok tulajdonságait azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{m_i, m_f = \pm \frac{1}{2}} \frac{d^2\sigma(i, \mathbf{k}_0, m_i \rightarrow f, \mathbf{k}, m_f)}{d\Omega dE} &= \frac{d^2\sigma(i, \mathbf{k}_0 \rightarrow f, \mathbf{k})}{d\Omega dE} = \\ &= \frac{k}{k_0} \delta(E_i - E_f - \varepsilon) \sum_{v, \mu=1}^N A_v A_\mu \langle i | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_v} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\mu} | i \rangle + \\ &+ \sum_{v, \mu=1}^N C_v C_\mu \sum_{u=1}^3 \langle i | S_v^{(u)} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_v} | f \rangle \langle f | S_\mu^{(u)} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\mu} | i \rangle \end{aligned} \quad (1.2)$$

A mérésekkel viszont a következő mennyiséget lehet összevetni:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \sum_i \sum_f W_i(T) \cdot \frac{d^2\sigma(i, \mathbf{k}_0 \rightarrow f, \mathbf{k})}{d\Omega dE} \quad (1.3)$$

Itt $W_i(T)$ annak valószínűsége, hogy a szóró rendszer $\{i\}$ kvantumszámokkal jellemzett állapota T hőmérsékleten előfordul.

Felhasználva a δ függvény alábbi előállítását,

$$\delta(E_i - E_f - \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} e^{\frac{i}{\hbar}(E_i - E_f)t} dt$$

(1.3)-ből az adódik, hogy

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}et} \left[\sum_{v,\mu} \sum_{i,f} W_i(T) \left\{ \langle i | A_v e^{iQr_v(t)} | f \rangle \cdot \right. \right. \\ \left. \left. \cdot \langle f | A_\mu e^{-iQr_\mu} | i \rangle + \sum_{u=1}^3 \langle i | C_v S_v^{(u)} e^{iQr_v(t)} | f \rangle \langle f | C_\mu S_\mu^{(u)} e^{-iQr_\mu} | i \rangle \right\} \right] dt$$

Itt feltételeztük, hogy a rendszer energiája nem függ a spintől, azaz $[H, S_v] = 0$. Az $|i\rangle$ és $|f\rangle$ állapotokat energia-sajátállapotoknak választottuk. Ezután mivel $\sum_f |f\rangle \langle f| = 1$, azt kapjuk, hogy*

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}et} \left[\sum_{v,\mu} \sum_i W_i(T) \{ A_v A_\mu \langle i | e^{iQr_v(t)} e^{-iQr_\mu} | i \rangle + \right. \\ \left. + C_v C_\mu \langle i | S_v S_\mu e^{iQr_v(t)} e^{-iQr_\mu} | i \rangle \} \right] dt \quad (1.4)$$

Itt $r_v(t)$ a v -ik mag t pillanatbeli koordináta-operátora a Heisenberg-reprezentációban. A Hamilton-operátor spinfüggetlensége miatt kézenfekvő, hogy

$$|i\rangle = |n\rangle |\lambda\rangle,$$

ahol $\{n\}$ a szóró rendszer pálya-kvantumszámainak, $\{\lambda\}$ pedig spinkvantumszámainak összességét jelenti, továbbá, hogy

$$W_i(T) = W_n(T) \cdot W_\lambda,$$

azaz a pálya- és spinkvantumszámok teljesen függetlenek egymástól. Ez valóban a Hamilton-operátor spinfüggetlenségének egyenes következménye, ha nincsenek egyforma atomok a rendszerben, de a Pauli-elvvel ellentétes, ha ilyenek vannak.** Megmutatható, hogy a Pauli-elv figyelmen kívül hagyása növekvő hőmérséklettel egyre kisebb hibákra vezet [2], [3]. A szobahőmérséklet ebből a szempontból már magas hőmérsékletnek számít.

Válasszunk ezután $|\lambda\rangle = |I_1 \dots I_N, M_1, \dots M_N\rangle$ -t, ahol I_α, M_α a α -edik atom spinkvantumszámait jelöli és tegyük fel, hogy minden spinbeállítás egyformán valószínű. Ekkor

$$W_\lambda = W_{M_1 \dots M_N} = \left\{ \prod_{v=1}^N (2I_v + 1) \right\}^{-1}$$

A fenti képletek alkalmazásával (1.4) alakja a következő lesz [3], [4]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{d^2\sigma_i}{d\Omega dt} + \frac{d^2\sigma_{koh}}{d\Omega dE} \quad (1.5)$$

* Ha a szóró rendszerben egyforma részek vannak, az (1.4) képlet levezetése valamivel bonyolultabb [2].

** Gondoljunk például a H_2 molekula kvantumelméletére. A pályaimpulzusmomentum-kvantumszám páros, illetve páratlan volta megszabja, hogy a molekula para vagy orto állapotban van-e, azaz kikötést jelent az eredő-spin kvantumszám értékére.

ahol az első tag koherens

$$\frac{d^2 \sigma_{koh}}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} \left[\sum_{\nu, \mu} A_\nu A_\mu \sum_n W_n(T) \langle n | e^{iQr_\nu(t)} e^{-iQr_\mu} | n \rangle \right] dt \quad (1.6a)$$

a második az inkoherens szórási hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d^2 \sigma_i}{d\Omega dE} = \frac{k}{k_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} \left[\sum_{\nu=1}^N C_\nu^2 \sum W_n(T) \langle n | e^{iQr_\nu(t)} e^{-iQr_\mu} | n \rangle \right] dt \quad (1.6b)$$

A koherens elnevezés arra utal, hogy a hatáskeresztmetszet nem bontható az egyes magokon történő szórás hatáskeresztmetszetének összegére.

A koherens hatáskeresztmetszetben szereplő vegyes ($\nu \neq \mu$) indexű tagokat interferencia tagoknak nevezzük, szemben az ún. direkt ($\nu = \mu$) tagokkal. Az inkoherens hatáskeresztmetszetben csak direkt tagok lépnek fel.

Ha feltesszük, hogy a szóró rendszer atomjai egyformák, és mindegyikük azonos környezetben van, a ν index helyébe 1-et, A_ν helyébe A -t írhatunk. Ezután a koherens hatáskeresztmetszet így írható:

$$\frac{1}{N} \frac{d^2 \sigma_{koh}}{d\Omega dE} = A^2 \frac{k}{k_0} S_{koh}(\mathbf{Q}, \varepsilon) \quad (1.7a)$$

ahol

$$S_{koh}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} F(\mathbf{Q}, t) dt \quad (1.7b)$$

$$F(\mathbf{Q}, t) = \sum_{\nu=1}^N \langle e^{iQr_\nu(t)} e^{-iQr_1} \rangle_T$$

és a T hőmérsékleten vett átlagérték

$$\langle \dots A \dots \rangle_T = \sum W_n(T) \langle n | \dots A \dots | n \rangle. \quad (1.7c)$$

Az $F(\mathbf{Q}, t)$ függvény a lassú neutronszóródás elméletének korrelációs függvénye.

Az inkoherens tag meghatározása szintén egy korrelációs függvény számítására vezethető vissza:

$$\frac{1}{N} \frac{d^2 \sigma_i}{d\Omega dE} = C^2 \cdot \frac{k}{k_0} S_i(\mathbf{Q}, \varepsilon) \quad (1.8a)$$

$$S_i(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} F_s(\mathbf{Q}, t) dt \quad (1.8b)$$

$$F_s(\mathbf{Q}, t) = \langle e^{iQr_1(t)} e^{-iQr_1} \rangle_T \quad (1.8c)$$

Az $F_s(\mathbf{Q}, t)$ függvény $F(\mathbf{Q}, t)$ -vel ellentétben egy és ugyanazon atom két idő-pontbeli helyvektorainak korrelációjára jellemző. Ezért saját-korrelációs függvénynek hívjuk. Az $S(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ és $S_i(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ függvények neve: koherens ill. inkoherens szórásfüggvény.

Elméletileg előnyös az inkoherens és a koherens szórádást külön tárgyalni, de nem felejtethetjük el, hogy ezek a szórási képben együtt jelentkeznek. Mégis egyes esetekben leválasztható az egyik vagy másik típusú szórást. A szórási amplitúdók értéke pl. olyan lehet, hogy a koherens (pl. alumínium) vagy inkoherens (hidrogén, vanádium) amplitúdó sokszorosa a másinak. Ilyenkor a szórádás túlnyomóan koherens, illetve inkoherens. Máskor előfordul, hogy pl. a koherens szórási kép intenzitás-eloszlásának menete előre ismert, esetleg éles csúcsokból áll, ekkor a kísérleti adatokból jól leválasztható.

A rendszer dinamikája a $F(\mathbf{Q}, t)$, $F_s(\mathbf{Q}, t)$ függvényeket teljesen meghatározza. Ugyanez vonatkozik természetesen $S(\mathbf{Q}, \varepsilon)$, $S_i(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -ra is. Célunk, általában a fordított feladat megoldása: a rendszer dinamikájának visszaállítása a szórási kép alapján.

Ez a feladat elvileg megoldható. Ha $S(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -t adott \mathbf{Q} mellett ε függvényében ismerjük, a korrelációs függvény Fourier-transzformációval meghatározható. Látni fogjuk azonban, hogy attól függően, hogyan választjuk a \mathbf{Q} paramétert a korrelációs függvényben (azaz a szóráskísérletben), a szóró rendszer mozgásának részletei más-más súllyal jelentkeznek $S(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -ban. Ezért, hogy $S(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -ból értékes felvilágosítást nyerjünk a mozgás tulajdonságaira, \mathbf{Q} -nak a szóró rendszer által megszabott bizonyos értékeit kell kiválasztanunk a kísérletben.

Megjegyzendő, hogy a fentiekben bevezetett korrelációs függvények nem csak a lassú neutronszórást elmélete szempontjából jelentősek. Megmutatható, hogy míg a látható fény Rayleigh-szórásának és a röntgensugarak szórásának hatáskeresztmetszete az $F(\mathbf{Q}, t)$ függvénnyel áll Fourier-transzformációs kapcsolatban, addig a γ -sugarak kötött rendszereken történő rezonancia-szórását, valamint az ezekben történő γ -emisszióknak, illetve abszorpcióknak hatáskeresztmetszete az $F_s(\mathbf{Q}, t)$ függvényre vezethető vissza. A látható fény Raman-szórásának hatáskeresztmetszete hasonló, de komplikáltabb módon függ össze az atomi dinamikával.

Azonban, a különböző típusú folyamatok közül a lassú neutronok szórása és a γ -fotonok rezonancia-abszorpciója, emissziója és szórása azok, melyekkel a fent említett kedvező \mathbf{Q} -tartomány hozzáférhető. Ezt később részletesen látni fogjuk. Most térjünk rá a konkrét szóró rendszerek vizsgálatára.

2. Szórás szabad magon

(1.8)-ból látható, hogy inkoherens esetben a szórásfüggvény meghatározásához a saját-korrelációs függvényt kell kiszámítani. Ez a feladat csak egymással kölcsönhatásban nem álló (ideális gáz) illetve harmonikusan kötött (alacsony hőmérsékletű kristály) szóró atomok esetén oldható meg egzaktul. Az ezekben az esetekben nyert eredmények, azonkívül, hogy önmagukban is érdekesek, a többi szóró rendszerre vonatkozó eredmények kiindulópontját képezik. Vizsgáljuk ezután az ideális gáz egy atomjának saját-korrelációs függvényét.

Az indexet (1.8c)-ben elhagyva

$$F_s(\mathbf{Q}, t) = \langle e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}(t)} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}(0)} \rangle_T \quad (2.1)$$

Szabadon mozgó atom esetében a Heisenberg-képbeli mozgásegyenletek és a Newton-egyenletek azonos alakja folytán

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(0) + \frac{1}{M} \mathbf{p}(0)t \quad (2.2)$$

ahol M a szóró atom tömege.

Most (2.2)-t (2.1)-be helyettesítjük és kihasználjuk, hogy ha A és B kommutátora szám, akkor [5]

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]} \quad (2.3)$$

Az $A = i\mathbf{Q}\mathbf{r}(t)$, $B = -i\mathbf{Q}\mathbf{r}(0)$ szereposztást választva

$$\frac{1}{2} [A, B] = -i \frac{\hbar \mathbf{Q}^2}{2M} t$$

adódik.

Evvel

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-iRt} \left\langle e^{\frac{\mathbf{Q}}{M} \mathbf{p}(0)t} \right\rangle_T \quad (2.4)$$

$R = \frac{\hbar \mathbf{Q}^2}{2M}$. A $\hbar R$ mennyiség jelentése világos. Ekkora energiával lökődik vissza egy M tömegű szabad nyugvó mag egy \mathbf{Q} impulzuscsereére vezető szórási folyamat következtében.

A (2.4)-ben szereplő átlagolást könnyen elvégezhetjük, ha figyelembe vesszük, hogy az ideális gázatom saját-függvényei síkhullámok és eltekintünk a kicserélődési effektusoktól. Eredményül az adódik, hogy [3].*

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-R \left(it + \frac{T}{\hbar} t^2 \right)} \quad (2.5)$$

Megjegyezzük, hogy ideális gáz esetén az interferenciatagokat szolgáltatató $\langle \exp \{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\alpha(t)\} \exp \{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_{\alpha'}(0)\} \rangle_T$, $\alpha \neq \alpha'$ alakú kifejezések eltűnnek. Ez esetben tehát a koherens szórásfüggvény is a saját-korrelációs függvénnyel áll kapcsolatban.

Ha nem korlátozódunk ideális gázra, akkor a helyzet természetesen megváltozik. (2.2) helyébe egy sokkal bonyolultabb formula

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(0) + \frac{1}{M} \mathbf{p}(0)t - \frac{1}{2!} \frac{1}{\hbar^2} [H, \mathbf{r}(0)] t^2 + \dots \quad (2.6)$$

lép és az energia-sajátállapotok nem impulzus sajátfüggvények többé. Mégis abból a tényből, hogy (2.6) kis időkre megegyezik (2.2)-vel, azt lehet remélni, hogy bármely rendszer saját-korrelációs függvénye kis időkre jól közelíthető valamilyen ideális gázszerű korrelációs függvénnyel.

Valóban (2.6)-ra támaszkodva és feltételezve, hogy

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{p}_\alpha^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2.7)$$

* A Boltzmann-állandót itt, és a továbbiakban egységnyiinek tekintjük.

az adódik, hogy

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = 1 - iRt + \frac{1}{2} \left[-R^2 - \frac{2R}{\hbar M} \langle p_z^2(0) \rangle_T \right] t^2 + \dots \quad (2.8)$$

Koordináta rendszerünk z -tengelyét a \mathbf{Q} irányában vettük fel.

(2.8) láthatóan megegyezik az ideális gáz saját-korrelációs függvénye Taylor-sorának első három tagjával feltéve, hogy T helyébe $T' = \frac{1}{M} \langle p_z^2(0) \rangle_T$ -t írunk.

Eszerint elegendően kis időkre

$$F_S(\mathbf{Q}, t) \cong e^{-R \left(it + \frac{T'}{\hbar} t^2 \right)} \quad (2.9)$$

vagyis egy T hőmérsékletű szóró rendszer saját-korrelációs függvénye kis időkre úgy viselkedik, mint a T' hőmérsékletű ideális gáz egy atomjának korrelációs függvénye. Arra a kérdésre, hogy az időnek mihez képest kell kicsinynek lenni, később fogunk választ kapni. Megjegyezzük, hogy elegendően magas hőmérsékleten $T' \approx T$.

(2.5) és (1.8b) birtokában nem nehéz meghatározni egy ideális gázatom szórási függvényét [3].

$$S_{id}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar RT}} \exp \left\{ -\frac{1}{4\hbar RT} [\varepsilon + \hbar R]^2 \right\} \quad (2.10)$$

Az eredmény láthatóan egy $-\hbar R$ közepű és $\sqrt{2\hbar RT}$ szórású Gauss-görbe. Adott impulzuscserére esetén a neutron várhatóan $\hbar R$ energiát ad át az ideális gáz egy atomjának, de ez az energiaérték a gázatomok hőmozgása miatt $\sqrt{2\hbar RT}$ szórást mutat.

Mielőtt rátérnénk a kristályokon történő neutronszerzés tárgyalására, ismerkedjünk meg a kristálydinamika alapfogalmaival.

3. A kristály dinamikájának alapfogalmai [6]

A kristályok bonyolult sokrészeske rendszerek. Az egyszerű kvantummechanikai tárgyalás lehetősége a következő tényen alapul:

A kristályt felépítő atomok szorosan vannak állandó egyensúlyi helyzetük közelében kötve és ezek az egyensúlyi helyzetek szabályos térbeli rácsot alkotnak. Ez a rács úgy jön létre, hogy az ún. elemi cellát adott $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ vektorokkal önmagával párhuzamosan végtelen sokszor eltoljuk. Ha az origótól \mathbf{a}_i irányba l_i -szer toljuk el, a cella helyét a $\mathbf{l} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$ vektor jellemzi.

Az elemi cella abban az esetben, ha egyetlen atomot tartalmaz (Bravais-rács), úgy adható meg, hogy élei éppen a \mathbf{a}_i vektorok, csúcán foglal helyet az atom.

Mi csak Bravais-típusú, köbös szimmetriájú rácsot vizsgálunk a továbbiakban, ilyen rendszerben kristályosodik a fémek jórésze.

Használni fogjuk az $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ egyenlőséggel meghatározott vektorokat, melyeket a reciproktér rács alapvektorainak hívnak, ezek egész számú többszöröseit építik fel a reciproktér rácsot. A Brillouin-zóna fogalmára is szükségünk lesz. Ez a reciproktér rács egy térfogateleme, melyet úgy nyerünk, hogy az origó és a legközelebbi rácsponthoz közötti szakaszok felező merőleges síkjait tekintjük, ezek éppen a Brillouin-zónát határolják.

A kristály vázát alkotó magok rendszerének Hamilton operátora, (az ún. adiabaticus közelítésben)

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{1}{2m_i} \mathbf{p}_i^2 + V(\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_N); \quad \mathbf{r}_k = \mathbf{l}_k + \mathbf{u}_k \quad (3.1)$$

alakú, ahol V az effektív potenciális energia, mint az egyensúlyi helyzetektől való távolság függvénye, melynek minimuma van az $\mathbf{u}_k=0$ helyen. Tett feltevésünk alapján ezt sorbafejtjük, $m_i=M$ a magok közös tömege, tehát

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} \sum \mathbf{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum (\mathbf{u}_i, \mathbf{G}_{l,l'} \mathbf{u}_{l'}) + \dots$$

ahol a $\mathbf{G}_{l,l'}$ tenzor komponensei:

$$\mathbf{G}_{l,l'}^{x,y} = \left. \frac{\partial^2 V(\dots \mathbf{u}_k \dots)}{\partial u_{l,x} \partial u_{l',y}} \right|_{\mathbf{u}_k=0}$$

A többi tag elhagyása jelenti az ún. harmonikus közelítést. Ennek érvényessége attól függ, mennyire maradnak kicsinyek a mozgás folyamán a kitérések. Álljunk meg egyelőre a sorfejtésben a másodfokú tagnál, az elhagyott tagokról később szó lesz. A maradó kvadratikus alakot a

$$\mathbf{u}_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}, \alpha}}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha} (a_{\mathbf{q}, \alpha} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{l}} + a_{\mathbf{q}, \alpha}^+ e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{l}}) \quad (3.2)$$

$$\mathbf{p}_l = \sqrt{\frac{\hbar M}{2N}} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \sqrt{\omega_{\mathbf{q}, \alpha}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha} (a_{\mathbf{q}, \alpha}^+ e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{l}} - a_{\mathbf{q}, \alpha} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{l}}) \quad (3.3)$$

$$\frac{da_{\mathbf{q}, \alpha}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, a_{\mathbf{q}, \alpha}] = -i\omega_{\mathbf{q}, \alpha} a_{\mathbf{q}, \alpha}$$

transzformációkkal* a következő alakra hozhatjuk:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \hbar \omega_{\mathbf{q}, \alpha} \left(a_{\mathbf{q}, \alpha}^+ a_{\mathbf{q}, \alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.4)$$

ahol \mathbf{q} a Brillouin-zónában veszi fel a $\frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{b}_3$ értékeket valamenyny n_i mellett, melyre $n_i < N_i$. (N_i a rács egyik éle, $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = N$), $\alpha = 1, 2, 3$ és ω^2 -k a $\mathbf{G}_{l,l'}$ kvadratikus alak sajátértékei, frekvencianégyzet dimenziójú mennyiségek.

Minden \mathbf{q} értékhez tehát három frekvencia tartozik, ezeket az α polarizációs index különbözteti meg.

A (3.1) típusú Hamilton-operátor alakjából látszik, hogy a harmonikus kristály energiája $3N$ független harmonikus oszcillátor energiájának összege. Az $n_{\mathbf{q}, \alpha} =$

* Mikor indexként használjuk, az \mathbf{l} és \mathbf{q} vektorok jelét elhagyjuk.

$= a_{q,\alpha}^+ a_{q,\alpha}$ operátor, a jól ismert részecskeszám-operátor $n_{q,\alpha}$ sajátértékei szerint rendezve az állapotokat, a kristály $|\dots n_{q,\alpha} \dots\rangle$ állapotán azt értjük, hogy a (q, α) -dik oszcillátor a $n_{q,\alpha}$ -dik nívón van gerjesztve, a kristály energiája tehát $\sum \hbar \omega_{q,\alpha} (n_{q,\alpha} + \frac{1}{2})$. Ugyanezt úgy is szokás mondani, hogy $n_{q,\alpha}$ darab \mathbf{q} kvázi-impulzusú, α polarizációjú fonon van gerjesztve. Ennek a következő a magyarázata. A \mathbf{q} vektor a (\mathbf{q}, α) oszcillátor-kvantumnak nem egyszerűen indexe, hanem „csaknem” impulzusa, mely ütközés során (mint látni fogjuk) bizonyos értelemben megmarad és impulzusként viselkedik. A fotonokkal való ilyen analógia alapján ezt az energiát és kvázi-impulzust hordozó kvantumot kvázi-részecskének tekintjük és fononnak nevezzük. A kristály sok tekintetben — pl. a neutronokkal való kölcsönhatása során is — úgy viselkedik, mint ilyen kvázirészecskékből álló Bose—Einstein-statisztikát követő ideális gáz.

A fonon energiáját és kváziimpulzusát az

$$\omega = \omega(\mathbf{q}, \alpha)$$

diszperziós összefüggés kapcsolja össze.

A szokásos esetekben a Brillouin-zónában a \mathbf{q} vektorok $0 - 1\text{\AA}^{-1}$ között változnak, a megfelelő frekvenciákra pedig $0 < \omega \lesssim 10^{13} \text{ sec}^{-1}$ igaz.

A szereplő $\mathbf{e}_{q,\alpha}$ ún. polarizációs vektorok a megfelelő (\mathbf{q}, α) fonon gerjesztésekor az egyes atomok kitérésének irányát jellemzik.

Mindeddig azzal a feltevéssel dolgoztunk, hogy az energiának a kitérések szerinti sorában az első el nem tűnő tagnál megállhatunk. A tapasztalat azt mutatja, hogy az olvadásponttól távol, alacsony hőmérsékleten a kitérések oly kicsinyek, hogy ez a feltevés lényegében helyes és igen pontos eredményekhez juthatunk, ha a további tagokat csak mint korrekciót vesszük tekintetbe. A sor további tagjaival a Hamilton-operátorban a kitérések, tehát végül is az a^+ és a operátorok magasabb hatványai jelennek meg. Ez arra vezet, hogy az „egy fononos” stb. állapotok már nem egzakt sajátállapotok többé. A fononok kölcsönhatásuk miatt véges élettartammal rendelkeznek, miközben az adott hullámszámú és polarizációjú fonon energiája elveszti élesen meghatározott értékét. Az olvadáspontot megközelítve, a fononállapotok egyre kevésbé stabilak, az ideális fonongáz modell, tehát a harmonikus közelítés egyre inkább korrigálandó és az olvadásponton a közelítés hirtelen elveszti értelmét: az egyensúlyi helyzeteket kijelölő kristályrács összeomlik és az anyag folyadékká válik. Egészen széles hőmérsékletű tartományban azonban a harmonikus közelítés, melyet a fonon-fonon és az ugyancsak felépő elektron-fonon kölcsönhatással kell javítanunk, jól bevált.

Mi az $F(\mathbf{Q}, t)$ függvényeket, először is $F_s(\mathbf{Q}, t)$ -t harmonikus közelítésben számoljuk, az említett élettartam stb. korrekciókkal nem foglalkozunk.

4. Inkoherens szórás kristályon

Számításainkat harmonikus közelítésben végezzük, az anharmonicitás okozta effektusokat később fogjuk röviden összefoglalni.

Első feladatunk a kristály saját-korrelációs függvényének kiszámítása. (1.8c)-ben ismét a (2.3) formulát szeretnénk alkalmazni. Ebből a célból meg kell határoznunk az ott szereplő kommutátort. A számítást a (3.2) és (3.3) képletek alapján

elvégezve az adódik, hogy

$$\frac{1}{2} [i\mathbf{Q}\mathbf{r}(t), -i\mathbf{Q}\mathbf{r}(0)] = -i\mathbf{Q}^2 \alpha_i(t) \quad (4.1)$$

$\alpha_i(t)$ pontos alakját később közöljük. Egyelőre vegyük tudomásul, hogy $\alpha_i(t)$ az idő valós függvénye. Ily módon alkalmazhatjuk (2.3)-at. Kapjuk, hogy

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-i\mathbf{Q}^2 \alpha_i(t)} \langle e^{i\mathbf{Q}[\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]} \rangle_T \quad (4.2)$$

Tisztán algebrai úton be lehet viszont látni [3], hogy harmonikus közelítésben

$$\langle e^{i\sum_{\lambda} (\zeta_{\lambda} a_{\lambda} + \zeta_{\lambda}^* a_{\lambda}^*)} \rangle_T = e^{-\frac{1}{2} \langle [\sum_{\lambda} \zeta_{\lambda} a_{\lambda} + \zeta_{\lambda}^* a_{\lambda}^*]^2 \rangle_T} \quad (4.3)$$

Ezzel

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-i\mathbf{Q}^2 \alpha_i(t)} e^{-\mathbf{Q}^2 \alpha_r(t)} \quad (4.4)$$

ahol

$$\alpha_r(t) = \frac{1}{2} \langle [z(t) - z(0)]^2 \rangle_T \quad (4.5)$$

$z(t)$, a t -pillanatbeli $\mathbf{r}(t)$ koordináta operátor \mathbf{Q} irányú vetületét jelöli. Ily módon $\alpha_r(t)$ az $\frac{1}{2}$ -s faktortól eltekintve egy atom t idő alatti \mathbf{Q} irányú elmozdulása négyzetének átlaga.

Ezek után néhány olyan kijelentést fogunk tenni $\alpha_r(t)$ -re vonatkozólag, melyek igazságát harmonikus kristály esetén (3.2) és (3.3) segítségével számítással ellenőrizhetjük. A későbbiek kedvéért azonban állításainkat egyelőre fizikai megfontolásokra fogjuk alapozni. Mindenek előtt világos, hogy $\alpha_r(t)$ az idő nem-negatív valós függvénye, továbbá $\alpha_r(0) = 0$. (4.5)-ben a négyzetreemelést elvégezve látjuk, hogy

$$\alpha_r(t) = \frac{1}{2} \langle z^2(t) + z^2(0) - z(0)z(t) - z(t)z(0) \rangle_T. \quad (4.6)$$

Várható, hogy a természetben előforduló esetekben

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle z(0)z(t) \rangle_T = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle z(t)z(0) \rangle = 0 \quad (4.7)$$

azaz egy atom két különböző időpontbeli helyzete közti korreláció az időkülönbség növekedtével megszűnik. Abból a tényből viszont, hogy a szóró rendszer környezetével termikus egyensúlyban van, következik, hogy

$$\langle z^2(t) \rangle_T = \langle z^2(0) \rangle_T. \quad (4.8)$$

Mindezek alapján felírhatjuk, hogy

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_r(t) = \langle z^2(+\infty) \rangle_T = \langle z^2(0) \rangle_T \quad (4.9)$$

A kristály lényeges tulajdonsága, hogy minden atomja „nagyjából a helyén van”. Ez azt jelenti, hogy az atom rezeg ugyan egyensúlyi helyzete körül, másszóval az atom termikus felhőt alkot, de ennek a termikus felhőnek a sugara véges, a kristály atomjai nem mozgékonyak. A (4.9)-ben szereplő $\langle z^2 \rangle_T$ mennyiség, nyilván közvetlen kapcsolatban van a termikus felhő sugarával, ily módon kristály esetében

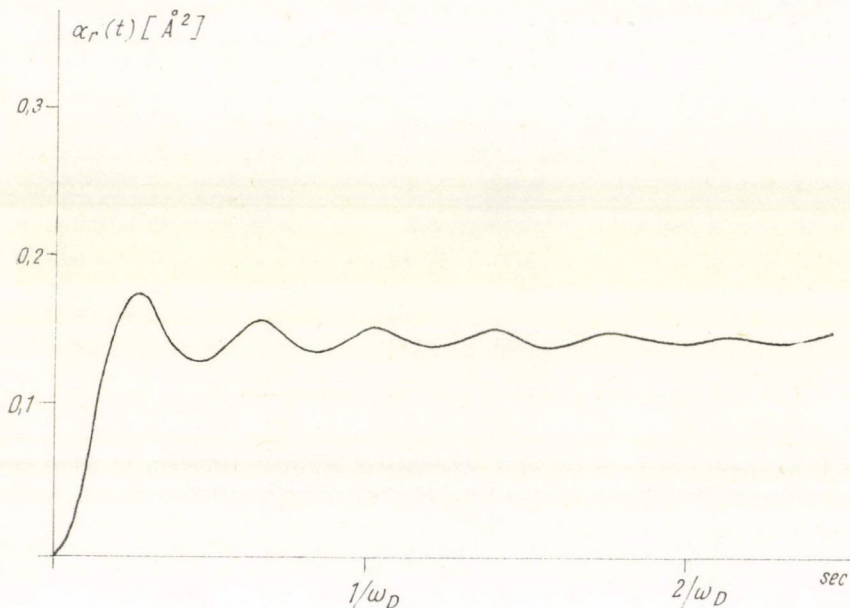
maga is véges. Levonhatjuk tehát azt a következtetést, hogy $\alpha_r(t)$, $t \rightarrow \infty$ -re véges értékhez tart. Az 1. ábrán $\alpha_r(t)$ -t látjuk Debye-kristályra az idő függvényében.

Látjuk, hogy az aszimptotikus érték beállásának ideje néhányszor $1/\omega_D$ (általában $1/\omega_D \cong 10^{-13}$ sec).

A $Q^2\alpha_r(+\infty)$ mennyiség már a röntgendiffrakció elméletéből ismeretes. Szokásos jelöléssel

$$Q^2\alpha_r(+\infty) = 2W. \quad (4.10)$$

$2W$ a kristály Debye—Waller faktora.



1. ábra. $\alpha_r(t)$ az idő függvényében szobahőmérsékletű Debye-kristályra

Mint azt a részletes számítás mutatja,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \alpha_i(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_i(t) = 0 \quad (4.11)$$

Ezért

$$\lim_{t \rightarrow 0} F_S(\mathbf{Q}, t) = 1; \quad \lim_{t \rightarrow \infty} F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-2W} \quad (4.12)$$

A sajátkorrelációs függvény (4.4) alakjából és az $\alpha_r(t)$ függvény viselkedéséből következik, hogy a saját-korrelációs függvény az 1 értékről néhányszor $1/\omega_D$ sec alatt e^{-2W} -re csökken. Ha most a saját-korrelációs függvényt így bontjuk fel

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-2W} + \tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t) \quad (4.13)$$

akkor először is $t=0$ -nál

$$\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, 0) = 1 - e^{-2W} \quad (4.14)$$

és $\tilde{F}_s(\mathbf{Q}, t)$ néhányszor $1/\omega_D$ másodperc alatt kezdő értékéről zérusra csökken.

(4.13)-t Fourier-transzformálva a szórásfüggvényre a következőt kapjuk:

$$S_{\text{ink}}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W} \delta(\varepsilon) + \tilde{S}(\mathbf{Q}, \varepsilon) \quad (4.15a)$$

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} \tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t) dt \quad (4.15b)$$

Ezzel a szórásképet egy éles rugalmas csúcsra és egy széles, δ -szerű szingularitást nem tartalmazó rugalmatlan részre bontottuk. A rugalmas csúcs megjelenése az atomok helyhez kötöttségének eredménye. Ha az atomok nem volnának helyhez kötve, akkor $\langle z^2 \rangle_T = \infty$ volna (ez a helyzet minden nem korlátozott mozgásnál) és a rugalmas csúcs nem jelenne meg. (A Mössbauer-effektus szintén az atomok helyhez kötöttségén alapszik.)

Nézzük most azt az esetet, amikor

$$Q^2 \alpha_r(+\infty) = 2W \ll 1. \quad (4.16)$$

(4.13), (4.14)-ből látszik, hogy ekkor $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ minden t -re elhanyagolhatóan kicsinnyé válik e^{-2W} -hez képest. Ez azt eredményezi, hogy a szórás túlnyomóan rugalmas. Más megfogalmazásban: a szórásképet egyedül a stacionárius termikus felhő adatai, $F_S(\mathbf{Q}, t)$ nagy idejű aszimptotikája határozza meg. A fotonokkal dolgozó elméletben éppen ez a visszalökődés nélküli emisszió, illetve abszorpció, más szóval a Mössbauer-effektus létrejöttének feltétele.

Gondoljuk most meg, mi történik, ha Q növekszik. Először is nyilvánvaló, hogy Q növekedtével $2W$ is nő, ezáltal a rugalmas csúcs amplitúdója csökken. A szórási képet egyre inkább $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ szabja meg.

Az is nyilvánvaló azonban, hogy $\tilde{S}(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -ban nem egyformán „érződnek” az $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ függvény különböző idejű részei. (4.4) és (4.13)-ból, továbbá abból, hogy $\alpha_r(t)$ pozitív és „lényegében” monoton növekvő függvénye az időnek, következik, hogy növekvő Q -val $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ egyre gyorsabban csökken és ily módon a (4.15b) integrálban egyre kisebb idők játszanak döntő szerepet. Azaz: minél nagyobb a Q , annál kisebb idejű korrelációkról kapunk felvilágosítást $\tilde{S}(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -ból.

A 2. pontban láttuk, hogy a saját-korrelációs függvény kisidejű viselkedése olyan, mint ideális gáz esetében. Igen nagy Q esetén, tehát a rugalmas csúcs egyre inkább eltűnik és a szórási kép egyre jobban hasonlít ahhoz, amely ideális gáz esetén jönne létre.

Világos tehát, hogy a túl kis- és túl nagy Q értékek egyaránt kedvezőtlenek a kristálydinamika kutatása szempontjából.

Túl kis Q -nál statikus, átlagolt viszonyokat látunk (kialakult termikus felhő), túl nagy Q -nál viszont a kötéssel kapcsolatos információkat veszítjük el. Ezért a kristálydinamika kutatása szempontjából a „közbülső” Q értékek lesznek jelentősek. Vizsgáljuk meg pontosan, melyek ezek az optimális Q értékek.

Ebből a célból írjuk $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ -t új alakban:

$$\alpha(t) = \alpha_r(t) + i\alpha_i(t) \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t) &= e^{-Q^2 \alpha(t)} - e^{-Q^2 \alpha(\infty)} = e^{-2W} \{e^{-Q^2 [\alpha(t) - \alpha(\infty)]} - 1\} = \\ &= e^{-2W} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-Q^2)^n [\alpha(t) - \alpha(\infty)]^n \end{aligned} \quad (4.18)$$

Legyen most \mathbf{Q} „kicsiny, de nem túlságosan”. Ezen azt értjük, hogy \mathbf{Q} legyen elég nagy ahhoz, hogy (4.13)-ban $\tilde{F}_s(\mathbf{Q}, t)$ számottevő legyen e^{-2W} mellett, de legyen elegendően kicsiny ahhoz, hogy a (4.18) sorfejtésben megállhassunk az első tagnál. Ekkor

$$\begin{aligned}\tilde{F}_s(\mathbf{Q}, t) &\cong -e^{-2W} \mathbf{Q}^2 [\alpha(t) - \alpha(\infty)] \\ \tilde{S}(\mathbf{Q}, \varepsilon) &\cong e^{-2W} S_1(\mathbf{Q}, \varepsilon) \\ S_1(\mathbf{Q}, \varepsilon) &= \frac{\mathbf{Q}^2}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} [\alpha(t) - \alpha(\infty)] dt\end{aligned}\quad (4.19)$$

A (4.17)-ben szereplő $\alpha(t)$ -t a (3.2) és (3.3), valamint (4.1) és (4.5) képletek segítségével kiértékelve:

$$\mathbf{Q}^2 \cdot \alpha(t) = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}, \alpha}} |\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha}|^2 [(n_{\mathbf{q}, \alpha} + 1) e^{-i\omega_{\mathbf{q}, \alpha} t} + n_{\mathbf{q}, \alpha} e^{i\omega_{\mathbf{q}, \alpha} t} + 2n_{\mathbf{q}, \alpha} + 1] \quad (4.20a)$$

ahol a betöltési szám átlagértéke T hőmérsékleten,

$$n_{\mathbf{q}, \alpha} = n(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}, \alpha}}{T}} - 1} \quad (4.20b)$$

Megmutatható, hogy az általunk vizsgált, köbös szimmetriájú esetekben az ilyen kifejezésben $|\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha}|^2$ helyébe $1/3 \cdot \mathbf{Q}^2$ -t írhatunk. Ekkor a \mathbf{q}, α szerinti összegezés ω szerinti összeggé alakul és ha az $(\omega, \omega + d\omega)$ frekvencia-intervallumban eső frekvenciák számát, $\mathcal{N}(\omega, \omega + d\omega)$ -t egy $f(\omega)$ függvénnyel jellemezzük a következő módon:

$$\frac{1}{3N} \cdot \mathcal{N}(\omega, \omega + d\omega) = f(\omega) d\omega$$

akkor $\alpha(t)$ -re ezt kapjuk

$$\alpha(t) = \frac{\hbar}{2M} \int f(\omega) \frac{1}{\omega} \{ [n(\omega) + 1] e^{-i\omega t} + n(\omega) e^{i\omega t} + 2n(\omega) + 1 \} d\omega \quad (4.21)$$

A frekvenciák eloszlását megadó $f(\omega)$ függvény neve: fonon-spektrum, integrálja az összes frekvenciára 1-et ad.

Látható először is az, hogy a Debye—Waller faktor a fonon-spektrummal a következőképpen függ össze:

$$2W = \mathbf{Q}^2 \alpha(\infty) = \mathbf{Q}^2 \cdot \frac{\hbar}{2M} \int f(\omega) [2n(\omega) + 1] d\omega$$

Másfelől azonban a (4.9) képlet szerint

$$S_1(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \begin{cases} \frac{\hbar \mathbf{Q}^2}{2M} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \cdot n\left(\frac{\varepsilon}{\hbar}\right) f\left(\frac{\varepsilon}{\hbar}\right) & \varepsilon > 0 \\ \frac{\hbar \mathbf{Q}^2}{2M} \left[n\left(\frac{|\varepsilon|}{\hbar}\right) + 1 \right] \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{|\varepsilon|}{\hbar}\right) & \varepsilon < 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

$S_1(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -t az egyfononos inkohereus szórásfüggvénynek hívjuk. Ha a szórási képből leválasztható, segítségével közvetlenül a fonon-spektrumot kapjuk meg. Ez éppen a kristályon végzett inkohereus szórás kísérletek célja.

Látható, hogy a kristálydinamika szempontjából optimális \mathbf{Q} értékek éppen azok, amelyek mellett az inelasztikus spektrumban a (4.17) sorfejtés első tagjából származó tag dominál, mert ez az a \mathbf{Q} tartomány, mely lehetővé teszi a fonon-spektrum meghatározását. A részletesebb vizsgálat kimutatja, hogy pl. Debye frekvencia spektrumot feltételezve a (4.17) sor $\lambda = \hbar \mathbf{Q}^2 / 2M\omega_D$ növekvő hatványai szerint halad. (ω_D a felső határfrekvencia.)

Mivel

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2M} = \hbar R = \frac{m}{M} \left[2E_0 + \varepsilon - 2E_0 \sqrt{1 + \frac{\varepsilon}{E_0} \cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)} \right] \quad (4.23)$$

ezért pl. vanádium fém esetében ($M = 51$ m) termikus neutronokra $\cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = 0$ -nál $\varepsilon \approx 0$ mellett a sorfejtés paramétere, $\lambda \sim 0,06$ és hideg neutronokra $\lambda \sim 0,02$. Ezek a λ értékek, tehát a megfelelő \mathbf{Q} értékek biztosítják, hogy a fononspektrum mérése lehetséges legyen.

Az eddigiekben harmonikus kristályról volt szó. Az anharmonikus effektusok eredményeinket természetesen módosítják [8], [9]. Megváltozik egyfelől a saját-korrelációs függvény alakja. A kitevőben nem csak \mathbf{Q}^2 szerepel, mint (4.4)-ben, hanem további, \mathbf{Q}^2 magasabb hatványaival arányos tagok is fellépnek. A számítások és mérések szerint ez a kevésbé jelentős változás. Sokkal lényegesebb a \mathbf{Q}^2 együtthatójának reális és képzetes részét adó $\alpha_r(t)$ és $\alpha_i(t)$ függvények megváltozása. Igen fontos körülmény azonban az, hogy $\alpha_r(t)$ fizikai tartalma nem változik. Nem változik meg tehát az a fizikai jelentéséből származó tény sem, hogy $\alpha_r(t)$ az idő (fluktuációktól eltekintve) monoton növekvő függvénye, mely $t \rightarrow \infty$ -re véges értékhez tart. Emlékezzünk vissza, hogy ez abból az egyszerű tényből következett, hogy a kristály atomjai helyhez kötöttek. Ez pedig nem a harmonicitásból következik, anharmonikus kristályra is igaz. Az a tény viszont, hogy $\alpha_r(t)$ az idő növekedtével véges értékhez tart, most is arra vezet, hogy a szórási kép egy éles rugalmas csúcsra és egy szingularitást nem tartalmazó rugalmatlan részre oszlik.

5. Inkohereus szórás folyadékon

Az 1. fejezetben láttuk, hogy a szórásfüggvény meghatározásának problémája egyenértékű a korrelációs függvény meghatározásával. Ez utóbbi feladat viszont a szórórendszer Hamilton-operátorának ismeretében, legalább is elvileg, elvégezhető. Ily módon kristályok és kvantumfolyadékok esetén a szórásfüggvény számítása pusztán matematikai problémát jelent. Teljesen más a helyzet reális folyadékoknál, mert az ilyen rendszer Hamilton-operátorát még közelítőleg sem ismerjük. Ekkor kénytelenek vagyunk közvetlenül a korrelációs függvényre vonatkozó feltevéseket tenni. A szokásos feltevés a következő:

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-\mathbf{Q}^2 \alpha(t)} \quad (5.1)$$

Eszerint a saját-korrelációs függvényt ugyanolyan típusúnak választják, mint amilyen harmonikus kristály esetében adódik. Ezt az eljárást egyfelől a kísérletekkel való összevetés, másrészt a saját-korrelációs függvény általános (a szóró rendszer konkrét

tulajdonságaitól független) tulajdonságaira vonatkozó elméleti vizsgálatok igazolják [8], [9].

Egy további közelítés abban áll, hogy a kitevőbe csak az $\alpha_r(t)$ -nek megfelelő kifejezést írják [4].

$$\alpha(t) = \frac{1}{2} \langle [z(t) - z(0)]^2 \rangle_T. \quad (5.2a)$$

Azonnal látjuk, hogy $\alpha(t)$ ilyen választása nem lehet helyes. Reális kitevő ugyanis nem mutathatja a (2.7) értelmében kötelező kis idejű viselkedést. Ugyanakkor az (5.2) alak a kitevő szemléletes jelentése folytán igen vonzó. Ezért történtek nagy erőfeszítések olyan eljárások kidolgozására, melyekkel az (5.2) segítségével elvégzett számításokat korrigálni lehet [10], [11].

A folyadék feltételezhető izotrópiája folytán $\alpha(t)$ nyilván nem függ a \mathbf{Q} vektor irányától. Ezért az

$$\alpha(t) = \frac{1}{6} \langle [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]^2 \rangle_T \quad (5.2b)$$

képletet szokás használni.

Mivel a folyadékfázis közbülső helyet foglal el a kristályos és gázfázis között és a kristályra jellemző szórási képet már jól ismerjük, célszerű meggondolni, milyen szórási kép adódik a másik határfázis esetén. Mindenekelőtt nyilvánvaló, hogy amikor a gázfázisban létrejövő szórási képről beszélünk, nem a ritka, ideális, hanem a sűrű, a forrásponthoz közel eső hőmérsékletű gázok esete érdekel bennünket. Ebben az esetben a (2.5) formula természetesen nem használható. Viszont a sűrű gázban az egyes atomok igen gyakran ütköznek és éppen erre az esetre érvényes a Brown-mozgás ismert képlete [12]:

$$\langle [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]^2 \rangle_T = 6Dt. \quad (5.3)$$

Itt D a gáz diffúziós állandója.

(5.3)-at és (5.2)-t (5.1)-be helyettesítve a Fourier-transzformáció után

$$S(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{\mathbf{Q}^2 D}{(\mathbf{Q}^2 D)^2 + \varepsilon^2} \quad (5.4)$$

adódik. Sűrű gáz esetén tehát egy sima Lorentz-típusú görbét nyerünk, melynek maximuma $\varepsilon=0$ -nál van.

A kísérletek azt mutatják [13], [14], [15], [16], hogy a folyadék által létrehozott szórási kép hasonlít is, különbözik is az egyes határfázisokban észlelt szórási képektől. A kristály szórási képével közös, hogy a szórt neutronok spektruma durván most is egy rugalmas és egy rugalmatlan részre tagolódik és az utóbbi éppen az „őskristály” szórási képét utánozza. A sűrű gázra emlékeztet viszont az, hogy a kristályra jellemző éles, rugalmas csúcs helyén egy szélesebb, (5.4)-re emlékeztető alakú csúcs emelkedik. Ezt hívják kvázielasztikus csúcsnak. Ugyanakkor meg kell jegyezni, hogy ennek a csúcsnak az alakja és az (5.4) formula között az egyezés csak közelítő.

A kísérleti eredmények kvalitatív magyarázatára a következő feltevéseket szokás tenni [17]:

$$1. \quad \alpha(t) = \alpha_{kr}(t) + \alpha_f(t), \quad (5.5)$$

ahol $\alpha_{kr}(t)$ éppen az őskristály $\alpha_r(t)$ -je, melynek tulajdonságait a 4. fejezetben tárgyaltuk. $\alpha_f(t)$ az őskristály és a folyadék atomi dinamikájából származó különb-

ségeket hivatott tekintetbe venni.

$$2. \quad \alpha_{kr}(t) \gg \alpha_f(t), \quad \text{ha} \quad t \ll \frac{1}{\omega_D} \quad (5.6)$$

E szerint a „kis-idejű viselkedés” ugyan olyan, mint a kristályban.

$$3. \quad \alpha(t) \approx \alpha_{kr}(\infty) + \alpha_f(t) \quad (5.7)$$

azaz a nagy-idejű viselkedést már a folyadék-jelleg határozza meg.

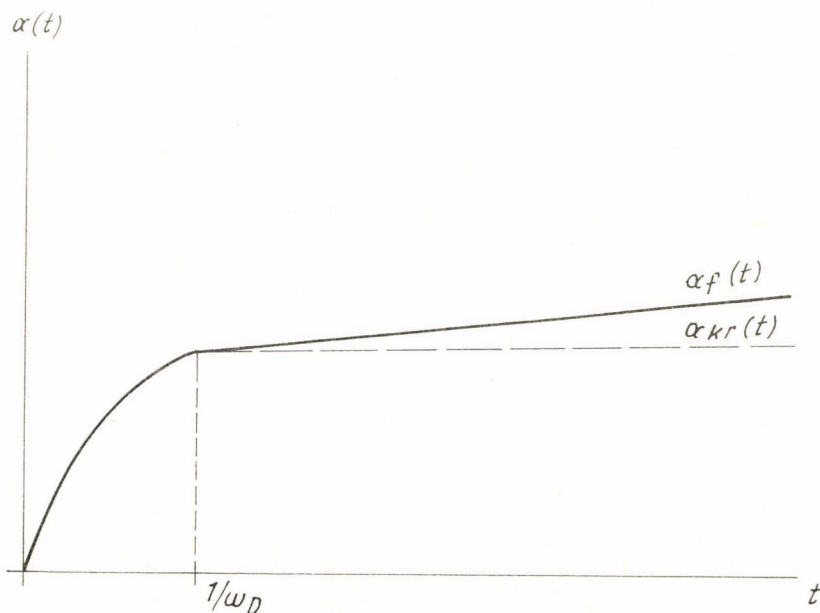
Míthogy a folyadékban a mozgás nem határolt, az atomok nem helyhez kötöttek, feltesszük, hogy

$$4. \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_f(t) = +\infty \quad (5.8)$$

Feltesszük ezen kívül még azt is, hogy

5. az $\alpha_f(t)$ függvény időben lassan változik.

Mindezek alapján $\alpha(t)$ -t a következő ábrával illusztrálhatjuk:



2. ábra. $\alpha(t)$ vázlatos rajza folyadék és kristály esetében

$\alpha_{kr}(t)$ -t vázlatosan rajzoltuk fel, elhagyva az 1. ábrán látható ingadozásokat. (Természetesen $\alpha_f(t)$ rajzából nem szabad azt a következtetést levonni, mintha ez a függvény mindenhol lineárisan változna.)

Ha feltevéseink igazak, akkor

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-Q^2[\alpha_{kr}(t) + \alpha_f(t)]} \quad (5.9)$$

A saját-korrelációs függvény $t=0$ -nál 1, és „lényegében” monoton csökken zérusig. Ugyanúgy, mint a 4. fejezetbeli $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ esetében, most is látszik, hogy $F_S(\mathbf{Q}, t)$ növekvő \mathbf{Q} -val egyre gyorsabban csökken és így módon az

$$S_{\text{ink.}}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} F_S(\mathbf{Q}, t) dt \quad (5.10)$$

integrálban annál kisebb idők játszanak döntő szerepet, minél nagyobb az impulzus-csere.

Mivel (5.5) és (5.6) szerint a folyadék kis idejű viselkedése és az őskristály kis idejű viselkedése megegyeznek, túl nagy \mathbf{Q} esetén kristály-jellegű szórási képhez jutunk: a nagy impulzuscserét szenvedő neutron „kristályt lát”. Ahhoz, hogy a neutron a folyadékeffektusokról adjon számot, megfelelően kis \mathbf{Q} értéket kell választani.

Nézzük meg ezután, hogy feltevéseink valóban elvezetnek-e a folyadékon létrejövő szórási kép magyarázatára.

Gondoljunk vissza arra, hogy kristályoknál a rugalmas-rugalmatlan tagolódásra a korrelációs függvény (4.13) felbontása vezetett. Feltevéseink alapján folyadékoknál ezt a felbontást így célszerű általánosítani.

$$F_S(\mathbf{Q}, t) = e^{-Q^2[\alpha_{kr}(\infty) + \alpha_f(t)]} + \{e^{-Q^2[\alpha_{kr}(t) + \alpha_f(t)]} - e^{-Q^2[\alpha_{kr}(\infty) + \alpha_f(t)]}\} \quad (5.11)$$

tehát $F_S(\mathbf{Q}, t)$ határértéke helyett, nagy idejű aszimptotikáját választjuk le. Feltevéseink értelmében a második tag időfüggése hasonlítani fog $\tilde{F}_S(\mathbf{Q}, t)$ idő függéséhez. Így módon a második tag Fourier-transzformáltja a 4. fejezetbeli $\tilde{S}(\mathbf{Q}, \varepsilon)$ -t fogja utánozni. Ezzel számot adtunk arról a tapasztalatról, hogy a rugalmatlan rész az őskristály szórási képéhez hasonlít.

Ha $\alpha_f(t)$ zérus vagy időben állandó volna, akkor az első tag rugalmas csúcsra vezetne. Az a tény, hogy $\alpha_f(t)$ az idő lassan változó, de végtelenhez tartó függvénye azt eredményezi, hogy nem éles, δ -szerű, hanem kiszélesedett csúcsot látunk. A folyadékatomok nem határolt térbeli mozgása (a folyadék folyékonysága) következtében létrejövő kvázielasztikus csúcsot az

$$S_{\text{kváziel}}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{e^{-Q^2\alpha_{kr}(\infty)}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} e^{-Q^2\alpha_f(t)} dt \quad (5.12)$$

képlettel lehet leírni.

Látjuk, hogy míg a spektrum rugalmatlan részét elsősorban $\alpha_{kr}(t)$ szabja meg, a kvázielasztikus csúcs alakjáért egyedül az $\alpha_f(t)$ -ben összefoglalt folyadék-effektusok felelősek. Ezért szokás a folyadék-effektusok vizsgálatát a kvázielasztikus csúcs mérésével végezni.

Fentebb említettük, hogy a folyadék-effektusok vizsgálatára megfelelően kis \mathbf{Q} értékeket kell választani. Óvatosnak kell lennünk azonban ezzel is. Ugyanúgy, mint előbb, most is nyilvánvaló, hogy minél nagyobb a \mathbf{Q} , annál kisebb idők dominálnak (5.12)-ben. $t \ll \frac{1}{\omega_D}$ -re feltevésünk értelmében a kvázielasztikus csúcs $e^{-Q^2\alpha_{kr}(\infty)}\delta(\varepsilon)$ -ba megy át. \mathbf{Q} -t csökkentve egyre nagyobb idők jutnak szerephez,

egyre hosszabb időket „látunk” és megjelennek a folyadékokra jellemző effektusok. Ezért mondtuk azt, hogy Q -nak kicsinynek kell lennie. A sztochasztikus folyamatok elméletében azonban bebizonyítják, hogy nem határolt mozgásnál elegendően nagy időkre

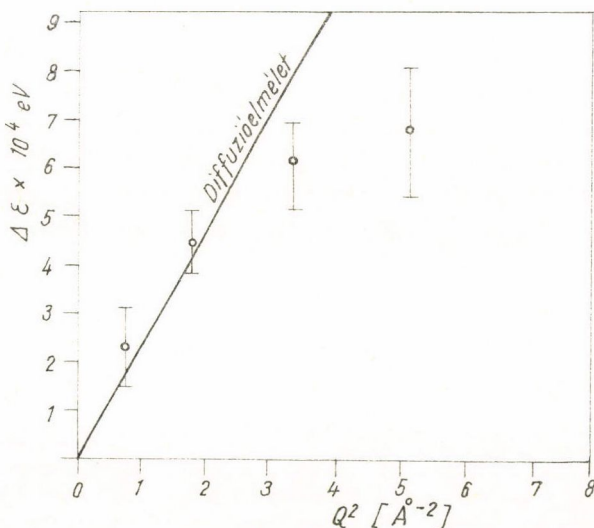
$$\langle [r(t) - r(0)]^2 \rangle_T \approx 6Dt, \quad (5.13)$$

ezért nagy t -kre

$$\alpha_f(t) \approx Dt. \quad (5.14)$$

Innen azonban következik, hogy túl kis Q -nál, mikor a viszonyokat már döntően $\alpha_f(t)$ nagy idejű aszimptotikája befolyásolja, a kvázielasztikus csúcs alakja ugyanolyan lesz, mint sűrű gáz esetén volna. Ebből viszont legfeljebb a folyadék diffúziós állandója határozható meg. E szerint az optimális Q értékek elegendően kicsinynek kell lenni ahhoz, hogy ne a kis idejű kristály-effektusokról és elegendően nagyoknak kell lennie ahhoz, hogy ne a nagy idejű viselkedést szolgáltató diffúziós mozgásról nyerjünk információkat.

Hogy kb. mekkora ez az optimális érték, azt víz esetén a svéd Larsson-csoport méréseiből állapíthatjuk meg [14]. Ezek a kutatók a kvázielasztikus csúcs szélességét határozták meg Q^2 függvényében. Eredményeiket a 3. ábra szemlélteti.

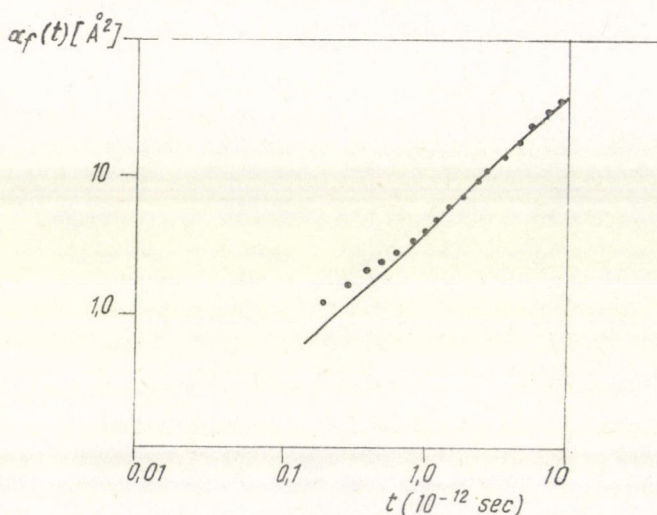


3. ábra. A kvázielasztikus csúcs szélessége Q^2 függvényében.
Az egyenes vonal a diffúzióelméleti eredmény

A szaggatott egyenes a diffúzió elmélet alapján számolt eredményt tünteti fel. ($D = 1,85 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{sec}$). Látjuk, hogy $Q^2 \cong 2 \text{ \AA}^{-2}$ -nél kisebb Q^2 -kre az eredmények megegyeznek a diffúzió-elméleti várakozással. Ennél kisebb Q^2 értékek esetén a neutron tehát már diffúziót „lát”. Az optimális Q^2 értékek $Q^2 = 2 \text{ \AA}^{-2}$ körül helyezkednek el. (4.23) képletből ekkor azt kapjuk, hogy ahhoz, hogy a kvázielasztikus

csúcsot ilyen kis Q -k mellett termikus neutronokkal vizsgáljuk, hozzáférhetetlenül kis szögeknél kellene mérni. Ezzel szemben a neutronok energiájának csökkentésével tetszőlegesen nagy szögek mellett is elérhetők a kívánt Q^2 értékek. Ezért jelent a folyadékok vizsgálata szempontjából nagy előnyt a hideg neutronok használata.

Neutronszerési kísérletekkel választ lehet adni arra a kérdésre is, hogy hol kezdődik az a tartomány, ahol $\alpha_f(t)$ már lényegében diffúzió-elméleti alapon számolható. Sakamoto és csoportja [18] a kváziasztikus csúcsot kimérve Fourier-transzformáció segítségével meghatározta $\alpha_f(t)$ -t víz esetén.



4. ábra. $\alpha_f(t)$ alakja víz esetén. Az egyenes a diffúzióelméleti eredmény. (log-log skála)

Az egyenes vonal a diffúzió-elmélet alapján van számítva, a pontok az $\alpha_f(t)$ -re vonatkozó eredményeket tüntetik fel, melyeket a mérés alapján számoltak. Látjuk, hogy $\alpha_f(t)$, $t > 10^{-12}$ sec esetén éri el aszimptotikus értékét. Ezek szerint az általunk vizsgált folyadék-effektusok a 10^{-13} -tól 10^{-12} sec-ig terjedő időintervallumban mutatkoznak. A fent megállapított optimális Q érték éppen e tartomány vizsgálatát teszi lehetővé.

Természetesen a folyadék-tulajdonságokat nemcsak neutronokkal lehet vizsgálni. Említettük, hogy a folyadékon történő Rayleigh-szórás, illetőleg a röntgensugarak szórásának hatáskeresztmetszete szintén az ismertetett korrelációs függvényekre vezethető vissza. A kváziasztikus csúcsra jellemző energiacserénél azonban látható fényre $Q^2 \leq 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ adódik. A látható fény Rayleigh-szórásánál tehát túl kis Q -nál dolgozunk. Röntgen-sugarak szórása esetén elérhető ugyan az optimális Q érték, de itt a kis energiacserék (néhány meV) mérése megoldhatatlan probléma. A mag-mágneses rezonancia vizsgálatokról is megmutatható, hogy segítségükkel „túl messzire látunk” és így módon csak a diffúziós állandó meghatározására használhatóak.

6. Koherens szórás kristályon

Koherens szórás a fényszórás elméletében rugalmas szórást jelent, melynél a különböző szórócentrumokról szórt fény amplitúdói összeadódnak. A neutronfizikában — mint látni fogjuk — szintén interferencia szórásról van szó, ez azonban általában nem rugalmas. Látni fogjuk továbbá, hogy a rugalmas koherens szórás itt is szerkezetmeghatározásra szolgál, de rendkívüli szerepe lesz éppen a rugalmatlan koherens szórásnak.

Tudjuk, hogy

$$S_{\text{koh}}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} F(\mathbf{Q}, t) dt$$

$$F(\mathbf{Q}, t) = \sum_{\mathbf{v}} \langle e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{v}}(t)} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_1} \rangle_T$$

kristály esetén ebből

$$F(\mathbf{Q}, t) = \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{l}} \langle e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{u}_{\mathbf{l}}(t)} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{u}_1} \rangle_T$$

adódik. A szokásos módon ez így alakítható át:

$$F(\mathbf{Q}, t) = e^{-2W_1} \sum e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{l}} e^{-\mathbf{Q}^2[\alpha_{\mathbf{l}}(t) - \alpha_{\mathbf{l}}(\infty)]}$$

$$\alpha_{\mathbf{l}}(t) = \frac{1}{2} [Z_1, Z_{\mathbf{l}}(t)] + \frac{1}{2} \langle [Z_{\mathbf{l}}(t) - Z_1]^2 \rangle - \langle Z_{\mathbf{l}}^2 \rangle$$

A részletes számítás arra vezet, hogy

$$Q^2[\alpha_{\mathbf{l}}(t) - \alpha_{\mathbf{l}}(\infty)] = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}, \alpha}} |\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha}|^2 \{ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l} - i\omega_{\mathbf{q}, \alpha}t} (n_{\mathbf{q}, \alpha} + 1) + n_{\mathbf{q}, \alpha} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l} + i\omega_{\mathbf{q}, \alpha}t} \}$$

tehát

$$S_{\text{koh}}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W_1} \sum e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{l}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} e^{-\mathbf{Q}^2[\alpha_{\mathbf{l}}(t) - \alpha_{\mathbf{l}}(\infty)]} dt$$

Az exponenciálist sorbafejtve

$$S_{\text{koh}}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = S^{(0)} + S^{(1)} + \dots$$

$$S^{(0)}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W_1} \delta(\varepsilon) \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{l}}$$

$$S^{(1)}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W_1} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \sum_{\mathbf{l}} e^{i(\mathbf{Q}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{l}} \cdot \begin{cases} \varphi_a \delta(\varepsilon - \hbar\omega_{\mathbf{q}, \alpha}) & \varepsilon > 0 \\ \varphi_e \delta(\varepsilon + \hbar\omega_{\mathbf{q}, \alpha}) & \varepsilon < 0 \end{cases}$$

$$\varphi_a = \frac{\hbar n(\omega)}{2M\omega_{\mathbf{q}, \alpha}} |\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha}|^2; \quad \varphi_e = \frac{\hbar [n(\omega) + 1]}{2M\omega_{\mathbf{q}, \alpha}} |\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}, \alpha}|^2$$

Az $\frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i}$ összeg jól ismert az optikai rácsok elméletéből, struktúra faktornak nevezik. Világos, hogy $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{(1)}\mathbf{b}_1 + \mathbf{Q}^{(2)}\mathbf{b}_2 + \mathbf{Q}^{(3)}\mathbf{b}_3 = \mathbf{Q}$ alakban a reciprokrács alapvektoraival kifejezve

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{l} = 2\pi \sum_i \mathbf{Q}^{(i)} l_i$$

adódik, tehát

$$\frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} = \prod_{i=1}^3 \left(\frac{1}{N_i} \sum_{l_i} e^{2\pi i \mathbf{Q}^{(i)} l_i} \right)$$

Az egyes összegeknek éles maximumuk van a $\mathbf{Q}^{(i)} = 0, 1, \dots$ értékeknél, tehát azon helyeken, ahol $\mathbf{Q} =$ reciprokrács vektor. Pontosabban belátható, hogy

$$\frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\tau} \delta(\mathbf{Q} - \tau) = \Delta(\mathbf{Q})$$

ahol v_0 az elemi cella térfogata. Az összegzés az összes τ reciprokrács vektor szerint történik. Ezzel azt kapjuk, hogy

$$S^{(0)}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W_1} \Delta(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon)$$

$$S^{(1)}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W_1} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \Delta(\mathbf{Q} + \mathbf{q}) [\delta(\varepsilon - \hbar\omega_{\mathbf{q}, \alpha}) \varphi_a + \delta(\varepsilon + \hbar\omega_{\mathbf{q}, \alpha}) \varphi_e]$$

Az első tag rugalmas szórást ír le, mely a $\mathbf{Q} = \tau$ reciprokrács vektor értékeknél éles maximumokkal rendelkezik. Ez a szokásos Bragg-szórás. A maximumok mérése a kristályszerkezet kutatásának eszköze. Segítségével feltérképezhető a reciprokrács. Minthogy a neutron hatáskeresztmetszet a szórási hosszak négyzetével és nem az elektronfelhő nagyságával arányos, a rugalmas tagon alapuló neutron-szerkezet vizsgálat, szemben az általában pontosabb röntgen szerkezetvizsgálatokkal, lehetővé teszi könnyű atomok, továbbá közel egyenlő atomsúlyú atomok helyzetének meghatározását. Mágneses szerkezetvizsgálatokra a neutrodiffrakció kizárólagos eszköz.

Nézzük most a második tagot. Áttérve a \mathbf{q} szerinti integrálásra, kapjuk:

$$S^{(1)}(\mathbf{Q}, \varepsilon) = e^{-2W_1} \sum_{\alpha} \varphi_a \delta[\varepsilon - \hbar\omega(\tilde{\mathbf{Q}}, \alpha)] + \varphi_e \delta[\varepsilon + \hbar\omega(\tilde{\mathbf{Q}}, \alpha)]$$

$$\tilde{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q} + \tau$$

eszerint az

$$\varepsilon = \pm \hbar\omega(\tilde{\mathbf{Q}}, \alpha)$$

értéknél csúcsot kapunk ε függvényében rögzített \mathbf{Q} mellett.

Ez azt jelenti, hogy a hatáskeresztmetszet csak ott nem tűnik el, ahol a neutron energia- és impulzus-nyeresége egy elnyelt vagy gerjesztett fononéval egyezik meg:

$$\varepsilon = \pm \hbar\omega(\mathbf{q}, \alpha)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{q} + \tau.$$

Kiemeljük, hogy a második egyenlőség szerint \mathbf{Q} nem feltétlenül egyenlő \mathbf{q} -val, hanem reciprokrács vektornyival különböztethető. (A fonon energiáját ez nem érinti, mert az $\omega(\mathbf{q}, \alpha)$ függvény a reciprokrács vektorokban periodikus.)

Ezért nem igazi impulzus a fonon kváziimpulzusa.

A fonon diszperziós relációjának mérése ezután úgy történik, hogy adott \mathbf{Q} mellett mérik a hatáskeresztmetszetet és a csúcsok a hozzátartozó $\hbar\omega(\mathbf{Q}, \alpha)$ ($\alpha = 1, 2, 3$) helyeken jelentkeznek. A kristály helyzetének ismeretében (ezt pl. diffrakcióval már előbb meghatározzák) az ekvenergikus felületeket a Brillouin-zónában már be lehet jelölni.

Minthogy a Brillouin-zóna sugara általában 1 \AA^{-1} körül van, a diszperziós összefüggés felvételéhez \mathbf{Q}^2 értékét a $(0, 1 \text{ \AA}^{-2})$ tartományban kell tudnunk változtatni. (4.23) segítségével nem nehéz megmutatni, hogy ez termikus vagy hideg neutronokkal könnyen elvégezhető (egy fonon gerjesztésekor az energiaátadás 0 és 10^{-2} eV között változik). Ezzel szemben infravörös fény esetében hiába változtatjuk a szórás szögét \mathbf{Q} mindig túl kicsi marad. Látható fényt használva a Brillouin-zóna sugarának ezred-, infravörös fényt használva százszázad részénél nem tudunk tovább jutni. A röntgensugaraknál fellépő nehézségekről már beszéltünk.

7. Neutronszórás molekulán

Az eddig felvetett szempontok alapján a molekulán történő szórásról csak néhány szót szólnunk.

Láttuk, hogy a neutron szórás kísérletek fölénye más vizsgálati módszerek felett abban áll, hogy a lassú és hideg neutronokkal lefedhető \mathbf{Q} tartomány éppen az, melyre az atomi dinamika kutatása szempontjából szükség van. Mivel mostanáig makroszkopikus targetekről volt szó, természetesen nem kellett törődnünk azzal, hogy milyen hatással van a szórási képre a targetnek, mint egésznek mozgása és visszalökődése. A helyzet megváltozik, ha ideális gáz molekuláin való szórást vizsgálunk. A részletes vizsgálat megmutatja, hogy a szórási képnek a molekula hőmozgása és visszalökődése következtében előálló torzulása növekvő $\frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2M}$ -el nő.

(Itt M a molekula tömege). Ezért, ha mikroszkopikus targetet (molekula) vizsgálunk, célszerű \mathbf{Q}^2 -t minél kisebbnek választani. Ez a körülmény döntő fölényt biztosít az infravörös és Raman-spektroszkópiának a molekularezgések kutatásában. A neutronspektroszkópiai módszerek csak akkor kerülhetnek előtérbe, ha a vizsgált molekula elegendően nagy. A szabad molekula neutron hatáskeresztmetszete ily módon nem fundamentális, hanem reaktorfizikai szempontból jelentős.

A helyzet természetesen megváltozik, ha nem szabad, hanem pl. kristályban kötött molekulákon való szórásról van szó. Az ilyen molekulák szabad, illetve akadályozott forgása erősen befolyásolja a szórási képet. Ez módot nyújt a kristályban és folyadékban végbemenő forgás természetének vizsgálatára. Az utóbbi időben sokan végeztek ilyen vizsgálatokat [19], [20]. Az ezzel kapcsolatos elméleti kérdésekre jelen összefoglalásunkban nem térünk ki.

IRODALOM

- [1] *Kisdi D.*: Magyar Fizikai Folyóirat ugyanezen száma.
- [2] *Kosály G.*, *Solt G.*, KFKI Reports 64—3.
- [3] *Zemach A. T.*, *Glauber R. I.*, Phys. Rev. 101, 118, 1956.
- [4] *L. Van Hove*, Phys. Rev. 95, 249, 1954.
- [5] *Weiss G. H.*, *Maradudin A. A.*, Journ. of Math. Phys. 3, 771, 1962.
- [6] *Leibfried G.*, Encyclopedia of Physics. 1955. Vol. 7 p. 104—325.
- [7] *Sjölander A.*, Ark. f. Phys. 14, 315, 1958.
- [8] *Sjölander A.*, Scattering of Slow Neutrons in Liquids — Report 1964.
- [9] *Rahman A.*, et al., Phys. Rev. 126, 986 1962.
- [10] *Nelkin M.*, Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. 1961. IAEA, Vienna.
- [11] *Schoefield P.*, Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. 1961. IAEA. Vienna.
- [12] *Chandrasekhar S.*, Rev. Mod. Phys. 15, 1, 1943.
- [13] *Hughes D. I. et al.*, Phys. Rev. 119, 872, 1960.
- [14] *Larsson K. E.*, *Dahlborg U.*, Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. 1963. IAEA. Chalk River.
- [15] *Brockhouse B. N. et al.*, Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. 1963. IAEA. Chalk River.
- [16] *Bata L.*, A folyadékszerkezet dinamikájának vizsgálata neutronokkal. KFKI Reports — 1963.
- [17] *Egelstaff P. A.*, *Schoefield P.*, Nucl. Sci. Eng. 12, 260, 1962.
- [18] *Sakamoto M. et al.*, Phys. Soc. Japan Suppl. B II 17 370, 1962.
- [19] *Mikke K.*: Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids 1963. IAEA. Chalk River.
- [20] *J. A. Janik et al.*, Report — BNL 7876 1964.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A NEMRELATIVISZTIKUS KVANTUMMECHANIKA FELÉPÍTÉSE A TÉRIDŐBEN*

R. P. FEYNMAN

A nemrelativisztikus kvantummechanikának a szokásostól eltérő megfogalmazását adjuk meg itt. Az mindazonáltal matematikailag ekvivalens a szokásos megfogalmazással. A kvantummechanikában valamely esemény valószínűségét, amely több különféle módon következhet be, egy komplex összeg abszolútérték-négyzete alakjában nyerjük; ezen összeg egyes tagjai a megvalósulás különböző alternatív lehetőségeinek felelnek meg. Annak valószínűsége, hogy azt találjuk: a részecske $x(t)$ pályája a téridő valamely adott tartományában fekszik, az ezen tartományba eső egyes pályák járulékaiból képezett összeg abszolútérték-négyzete. Az egyes pályák járuléka — ezt posztuláljuk — egy-egy exponenciális kifejezés, melynek (képzetes) fázisa (egységnek \hbar -t választva) a szóban forgó pályához tartozó klasszikus hatás. A múltból kiinduló, az x, t téridő-pontba érkező pályáktól származó teljes járulék a $\psi(x, t)$ hullámfüggvényt adja meg. Megmutatjuk, hogy ez eleget tesz a Schrödinger-egyenletnek. Tárgyaljuk a mátrix- és operátor-algebrával fennálló kapcsolatot. Utalunk egyes alkalmazásokra, így a tér oszcillációt leíró koordináták kiküszöbölésére a kvantumelektrodinamika egyenleteiből.

1. Bevezetés

Érdekes történeti tény, hogy a modern kvantummechanika kezdetét két merőben különböző matematikai megfogalmazás képezi: *Schrödinger* differenciálegyenlete és *Heisenberg* mátrix-algebrája. A kvantummechanika e két, látszatra oly eltérő felépítése matematikailag egyenértékűnek bizonyult. E két nézőpont, melyek egymást kiegészítik, végül is *Dirac* transzformáció-elméletében jutott el a szintézishez.

Az, amit ebben a dolgozatban ismertetünk, lényegében egy harmadik megfogalmazása a nemrelativisztikus kvantumelméletnek. E megfogalmazásra az ösztönzést *Dirac* [1, 2] egyes megjegyzései szolgáltatták, melyeket a klasszikus hatás [3] és a kvantummechanika viszonyáról tett. A részecskének az idő függvényeként megadott egész mozgásához rendelünk valószínűségi amplitúdót, nem pedig egyszerűen a részecske adott időpontban elfoglalt helyzetéhez.

Ez a megfogalmazás a szokásos megfogalmazásokkal matematikailag ekvivalens. Alapvetően új eredményeket nem kapunk tehát. Örömet okoz azonban, hogy a régi dolgokat új szemszögből szemlélhetjük. Vannak ezen kívül problémák, melyek esetében az új nézőpont határozott előnnyel jár. Ha pl. két rendszer, A és B kölcsönhatásban áll, ezek egyikének, mondjuk B -nek koordinátáit kiküszöbölhetjük az A mozgását leíró egyenletekből. A kölcsönhatást B -vel az A mozgásához rendelt valószínűségi amplitúdó képletében fellépő változás reprezentálja. Ez analógiában áll a klasszikus elméletben uralkodó viszonyokkal, ahol B hatását reprezentál-

* Rev. Mod. Phys. 20, 367, 1948.

hatjuk az A rendszer mozgásegyenletén eszközölt változtatással (mely abban áll, hogy bevezetjük az A -ra ható erőket). Ily módon az elektromágneses tér transzverzális oszcillátorait, ugyanúgy mint a longitudinális oszcillátorokat, kiküszöbölhetjük a kvantumelektrodinamika egyenleteiből.

Ezen felül mindig meg van arra a remény, hogy az új nézőpont ösztönzéssel szolgál majd új elgondolások születéséhez, melyek a jelenlegi elméletek módosítását célozzák. Ilyen módosításokra szükség van ahhoz, hogy az elmélet érvénye a legújabb kísérletekre is kiterjedjen.

Először a kvantummechanikai valószínűségi amplitúdók szuperpozíciójának általános fogalmát tárgyaljuk. Majd megmutatjuk, miképpen lehet ezt a fogalmat közvetlenül kiterjeszteni oly módon, hogy valószínűségi amplitúdót definiálhassunk bármily mozgásra (világvonalra) a téridőben. A közönséges kvantummechanika, mint megmutatjuk, azon posztulátumból adódik, amely szerint a valószínűségi amplitúdó fázisa arányos az adott világvonalra vonatkozó, klasszikusan meghatározott hatással. Ez akkor igaz, ha a hatás a sebesség kvadratikus függvényének idő szerint képezett integrálja. Tárgyalását adjuk a mátrix- és operátor-algebrával fennálló kapcsolatnak, a lehető legszorosabban ragaszkodva az új megfogalmazás nyelvezetéhez. Gyakorlati előnyt ez nem jelent, de a képletek igen szuggesztívek, ha a hatásfunkcionálok tágabb osztályára kiterjedő általánosítást tartjuk szem előtt. Végül a megfogalmazás alkalmazásait tárgyaljuk. Speciális példaképpen megmutatjuk, miként küszöbölhetők ki egy harmonikus oszcillátor koordinátái valamely rendszer mozgásegyenleteiből, mellyel az kölcsönhatásban áll. Ezt közvetlenül felhasználhatjuk a kvantumelektrodinamikában való alkalmazás céljára. Tárgyaljuk megfogalmazásunknak a spin- és relativisztikus effektusokat felölelő formális kiterjesztését.

2. Valószínűségi amplitúdók szuperpozíciója

Az ismertetni kívánt megfogalmazás mint lényeges gondolatot magában foglalja az idő valamely adott függvénye segítségével teljes mértékben meghatározott mozgásnak megfelelő valószínűségi amplitúdó fogalmát. Éppen ezért érdemes részleteiben áttekintenünk a valószínűségi amplitúdók szuperpozíciójának fogalmát a kvantummechanikában. Megvizsgáljuk a fizikai nézőpont azon lényeges változásait, amelyeket a klasszikus fizikáról a kvantumfizikára való áttérés követel meg.

Vegyünk szemügyre ebből a célból egy gondolatkísérletet, mely három egymást követő mérést foglal magában; először mérjük meg az A mennyiséget, azután B -t, végül C -t. Nem feltétlenül szükséges, hogy három különböző mennyiséget mérjünk meg; teljesen megfelel, ha pl. három szukcesszív helymérést tartunk szem előtt. Legyen a az A mérés egyik lehetséges eredménye, b és c pedig jelölje B , ill. C egy-egy lehetséges eredményét [4]. Felteesszük, hogy A , B és C olyan típusú mérések, amelyek az állapotot a kvantummechanikában teljesen meghatározzák. Így pl. felteesszük, hogy az állapot, melyben B értéke b -vel egyenlő, nem elfajult.

Jól ismert, hogy a kvantummechanika valószínűségekkel foglalkozik; ez a megállapítás azonban természetesen korántsem fest teljes képet. Annak érdekében, hogy világosabban juttassuk kifejezésre a klasszikus és a kvantumelmélet között fennálló viszonyt, mondhatnánk, hogy a klasszikus elméletben is valószínűségekkel van dolgunk, a valószínűségek azonban mind a zérus vagy az egy értéket veszik fel. Ennél megfelelőbb példa, ha a klasszikus esetben a klasszikus statisztikus mecha-

nika értelmében vett valószínűségeket tartunk szem előtt (mikor is esetleg egyes belső koordináták nincsenek teljesen meghatározva).

Jelentse P_{ab} annak valószínűségét, hogy amennyiben az A mérés az a eredményt adta, a B mérés a b eredményt szolgáltatassa. Hasonlóképpen P_{bc} annak a valószínűsége, hogy ha a B mérés a b eredményt adta, a C mérés a c eredményre vezessen. Legyen továbbá P_{ac} annak valószínűsége, hogy amennyiben A az a eredményt szolgáltatatta, a C mérés a c eredményt adja. Végezetül P_{abc} legyen mindhárom eseménynek megfelelő valószínűség, azaz legyen annak valószínűsége, hogy amennyiben A az a eredményt adta, B pedig b -t, végül C a c eredményre vezessen. Ha az a és b közé eső események függetlenek a b és c közé eső eseményektől, úgy

$$P_{abc} = P_{ab} P_{bc}. \quad (1)$$

A kvantummechanika szerint ez akkor igaz, ha a megállapítás, miszerint B eredménye b , az állapotot teljesen meghatározza.

Minden esetre azt várjuk, hogy fennálljon a

$$P_{ac} = \sum_b P_{abc} \quad (2)$$

reláció; mégpedig azért, mert ha a kezdetben elvégzett A mérés a -t adja és később azt találjuk, hogy a rendszeren elvégzett C mérés eredménye c , úgy kell, hogy az A és C közé eső időben B valamilyen értékkel rendelkezzen. Annak a valószínűsége, hogy ez az érték b legyen, P_{abc} -vel egyenlő. A b -t illető, egymást kizáró lehetőségekre összegezzünk vagy integrálunk (ezt \sum_b jelzi).

A klasszikus és a kvantumfizika között fennálló lényeges különbség a (2) egyenletben rejlik. A klasszikus elméletben az mindig igaz. A kvantummechanikában gyakran nem teljesül. Annak kvantummechanikai valószínűségét, hogy az a eredményt szolgáltatató A mérés után a C mérés a c eredményt szolgáltatassa, jelölje P_{ac}^q . A (2) egyenletet a kvantummechanikában a következő figyelemre méltó törvény helyettesíti [5]: Léteznek bizonyos φ_{ab} , φ_{bc} , φ_{ac} komplex számok, melyekre fennáll

$$P_{ab} = |\varphi_{ab}|^2, \quad P_{bc} = |\varphi_{bc}|^2 \quad \text{és} \quad P_{ac}^q = |\varphi_{ac}|^2; \quad (3)$$

az (1) és (2) kombinálásával nyert

$$P_{ac} = \sum_b P_{ab} P_{bc} \quad (4)$$

klasszikus törvény helyét

$$\varphi_{ac} = \sum_b \varphi_{ab} \varphi_{bc} \quad (5)$$

foglalja el.

Ha (5) helytálló, (4) rendszerint nem áll fenn. A (4) levezetése során elkövetett logikai hiba természetesen annak feltételezésében állott, hogy az a és c mérések között a rendszer szükségképpen olyan feltételek között végzi mozgását, amelyek mellett B mindenkor valamely határozott b értékkel rendelkezik.

Ha megkíséréljük, hogy erről meggyőződjünk, azaz ha az A és a C kísérletek között elvégezzük a B mérést, úgy a (4) képlet ténylegesen fennáll. Pontosabban, ha felállítunk egy berendezést, melyet B mérésére használunk, de a mérés eredményét nem használjuk fel abban az értelemben, hogy csak A és C korrelációját regisztráljuk és vetjük vizsgálatnak alá, úgy (4) helytálló. Ez azért van így, mert a B

mérőeszköz elvégezte feladatát; ha kívánjuk, bármikor, leolvashatjuk a műszert anélkül, hogy a viszonyokat bármiképpen megzavarnánk. Az a és c eredményt szolgáltatató kísérletek ennél fogva csoportokba oszthatók b értékének megfelelően.

Ha a valószínűséget a gyakoriság szemszögéből szemléljük, (4) egyszerűen azon megállapításból következik, hogy minden kísérletben, mely az a , c eredményeket szolgáltatta, B valamely értékkel rendelkezett. Egyetlen mód van arra, hogy (4) érvénytelen legyen; nevezetesen ha a kijelentés: „ B valamely értékkel rendelkezik” némely esetben értelmét veszti. Minthogy (5) csak abban az esetben foglalja el (4) helyét, ha B mérését nem kíséreljük meg, azt mondhatjuk: a kijelentés, miszerint „ B valamely értékkel rendelkezik”, értelmét veszítheti, valahányszor nem kíséreljük meg B mérését [6].

Eszerint attól függően, megkíséreljük-e B mérését vagy sem, a és c korrelációjára különböző eredményeket nyerünk, nevezetesen a (4) vagy az (5) egyenletet. Bármily finom módszerrel kíséreljük is meg B mérését, kísérletünknek meg kell zavarnia a rendszert, legalább is oly mértékben, hogy az (5)-tel megadott eredmények helyett a (4)-ből következő eredmények adódjanak [7]. Azt, hogy a mérések valóban a szükséges zavarást eredményezik, és azt, hogy — lényegében véve — a (4) összefüggés nem-helytállóan bizonyulhat, első ízben Heisenberg mondta ki a határozatlansági elvben. Az (5) törvény részint Schrödinger eredményeiből, valamint a Born és Jordan által megadott statisztikus értelmezésből, és Dirac transzformáció-elméletéből következik [8].

Az (5) egyenlet jellegzetes kifejezője az anyag hullámtermészetének. Eszerint annak valószínűsége, hogy azt találjuk: a részecske a -ból c -be jut több különböző úton (b értéken) át, bizonyos komplex mennyiségek abszolútérték-négyzete alakjában nyerjük, hol minden egyes lehetséges útnak megfelel egy-egy ilyen komplex mennyiség. A valószínűség jellegzetes interferencia-jelenségeket mutathat, amilyenek rendszerint hullámokkal kapcsolatban jelentkeznek, melyek intenzitását a különböző forrásokból eredő járulékok négyzetösszege adja meg. Az elektron hullámként viselkedik, mondhatni [vö. (5)], mindaddig, amíg nem teszünk kísérletet arra, hogy részecske-voltáról meggyőződjünk; ha ezt meg tesszük, (4) lesz érvényes, és az elektron részecskeként viselkedik.

Ez természetesen mind jól ismert. A múltban mindezt sokszor kifejtették már [9]. Mindazonáltal érdemes hangsúlyozni azt, hogy ez mind közvetlen következménye (5)-nek; a kvantummechanika általam megadott megfogalmazásának ugyanis lényegében véve (5) képezi az alapját.

A (4) és (5) képletek általánosítása több mérés, mondjuk A, B, C, D, \dots, K esetére természetesen a következő: annak valószínűségét, hogy az a, b, c, d, \dots, k sorozat adódjék,

$$P_{abcd\dots k} = |\varphi_{abcd\dots k}|^2$$

szolgáltatja. Annak valószínűsége, hogy pl. az a, c, k eredmény adódjék, ha a $b, d \dots$ mennyiségeket megmérjük, a

$$P_{ack} = \sum_b \sum_d \dots P_{abcd\dots k} \quad (6)$$

klasszikus kifejezés. Ezzel szemben ugyanezen a, c, k eredményssorozat valószínűsége, ha A és C , valamint C és K között nem végzünk mérést,

$$P_{ack}^q = \left| \sum_b \sum_d \dots \varphi_{abcd\dots k} \right|^2. \quad (7)$$

A $\varphi_{abcd\dots k}$ mennyiséget nevezhetjük az $A=a, B=b, C=c, D=d, \dots, K=k$ mérési eredményhez rendelt valószínűségi amplitúdónak. (Természetesen ezt kifejezhetjük a $\varphi_{ab}\varphi_{bc}\varphi_{cd}\dots\varphi_{jk}$ szorzat alakjában).

3. Adott világvonalhoz tartozó valószínűségi amplitúdó a téridőben

Az előző szakasz fizikai gondolatai kézenfekvő módon általánosíthatók, valamely jól meghatározott világvonalnak megfelelő valószínűségi amplitúdót értelmezve a téridőben. Ezt az egydimenziós probléma esetére szorítkozva fogjuk kifejteni, minthogy az általánosítás több dimenzióra nyilvánvaló.

Tegyük fel, hogy az adott részecske koordinátája különféle értékeket vehet fel. Gondoljuk el, hogy egymást követően nagyszámú helymérést végeztünk el; ezeket válassza el egymástól a kicsiny ε időköz. A mérések A, B, C, \dots sorozatának szerepét betöltheti az x koordináta t_1, t_2, t_3, \dots időpontokban elvégzett méréseinek sorozata, ahol $t_{i+1} = t_i + \varepsilon$. Jelölje a t_i időpontban elvégzett koordinátamérés eredményét x_i . Eszerint, ha A jelöli x mérését a t_1 időpontban, úgy x_1 az, amit korábban a -val jelöltünk. Klasszikus szemszögből tekintve a koordináta szukcesszív x_1, x_2, x_3, \dots értékei gyakorlatilag egy $x(t)$ pályát definiálnak. Azt tervezzük, hogy végül az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenetet végezzük el.

Egy ilyen pálya valószínűsége az $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots$ koordináták függvénye: $P(\dots x_i, x_{i+1} \dots)$. Annak valószínűsége, hogy a pálya a tér-idő valamely R tartományában feksdjön, klasszikusan P -nek R -re kiterjesztett integrálásával nyerhető. Eszerint annak valószínűségét, hogy x_i az a_i és a b_i , x_{i+1} az a_{i+1} és a b_{i+1} határok között fekszik s.í.t.

$$\begin{aligned} & \dots \int_{a_i}^{b_i} \int_{a_{i+1}}^{b_{i+1}} \dots P(\dots x_i, x_{i+1}, \dots) \dots dx_i dx_{i+1} \dots = \\ & = \dots \int_R P(\dots x_i, x_{i+1}, \dots) \dots dx_i dx_{i+1} \dots \end{aligned} \quad (8)$$

adja meg; az \int_R jel azt jelenti, hogy az integrálást a változók azon értékeire kell kiterjeszteni, amelyek az R tartományban fekszenek. Ez egyszerűen a (6) egyenlet, ahol a, b, \dots helyét x_1, x_2, \dots foglalta el, az összegezés helyére pedig integrálás lépett.

A kvantummechanikában ez abban az esetben a helyes képlet, amikor is az $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots$ változókat ténylegesen megmértük, majd kiválasztottuk azokat a pályákat, amelyek R -ben fekszenek. Azt várjuk, hogy más eredmény adódnék, ha nem végeztünk volna el ilyen részletes mérést. Tegyük fel, hogy olyan mérést végzünk, mely csupán annak megállapítására alkalmas, hogy a pálya valahol R -en belül fekszik.

Ez az a mérés, amelyet „ideális mérés”-nek nevezhetünk. Feltesszük, hogy e mérésből további részletek nem tudhatók meg a rendszer újabb megzavarása nélkül. Nem sikerült erre precíz definíciót találnom. Arra törekszünk, hogy elkerüljük külön bizonytalanságok felléptét, melyekre azután átlagolni kell abban az esetben, ha pl. több adat mérését végeznénk el, de az eredményt nem használnánk fel. Az (5), ill. (7) összefüggést kívánjuk használni minden x_i -re; a (4) mintájú összegek felléptét el akarjuk kerülni.

Várakozásunk szerint annak valószínűsége, hogy a részecskét „ideális mérésünk” segítségével ténylegesen az R tartományban találjuk, abszolútérték-négyzete lesz valamely komplex számnak: $|\varphi(R)|^2$. A $\varphi(R)$ számot, melyet az R tartományhoz tartozó valószínűségi amplitúdónak nevezhetünk, (7) adja meg, ha abban a, b, \dots helyére az x_i, x_{i+1}, \dots koordinátákat írjuk, az összegezést pedig integrálással helyettesítjük:

$$\varphi(R) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_R \Phi(\dots x_i, x_{i+1} \dots) \dots dx_i dx_{i+1} \dots \quad (9)$$

A $\Phi(\dots x_i, x_{i+1} \dots)$ komplex szám a pályát meghatározó x_i változók függvénye. Ténylegesen úgy gondoljuk, hogy az ε időköz zérushoz tart, úgyhogy Φ ily módon az egész $x(t)$ pályától függ, s nem csupán az egyes t_i időpontokhoz tartozó $x_i = x(t_i)$ értékektől. Nevezhetjük Φ -t az $x(t)$ pályák valószínűségi amplitúdó-funkciónáljának.

Ezeket az elgondolásokat összegezve kimondhatjuk első posztulátumunkat:

I. Ha ideális mérést végzünk annak megállapítására, vajon a részecske pályája adott téridő-tartományban fekszik-e, úgy a pozitív eredmény valószínűsége bizonyos komplex járulékok összegének abszolútérték-négyzete; az adott tartományban minden egyes pályának egy-egy ilyen járulék felel meg.

A posztulátum megfogalmazása nem teljes. Nem egyértelmű, mit jelent az, hogy az összegben „minden egyes” pályának egy-egy tag felel meg. A szabatos értelmezés, melyet (9) ad meg, a következő: A pályát először csupán az x_i helyzetek segítségével adjuk meg, melyeken az az egyenlő közökkel elválasztott t_i időpontokban áthalad ($t_i = t_{i-1} + \varepsilon$) [10]. Ekkor az R -be eső koordináta-értékek mindegyikéhez egyenlő súly tartozik. A súly tényleges értéke függ ε -tól és oly módon választható, hogy a bizonyos esemény valószínűsége egyre normált legyen. Meglehet, hogy nem a legjobb ily módon eljárni, e súlyfaktort azonban második posztulátumunkban benne hagytuk egy arányossági tényezőben. Az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenetet a számítás végén kell elvégeznünk.

Ha a rendszer több szabadsági fokú, a koordinátatér többdimenziós, úgyhogy k szabadsági fokú rendszer esetén az x szimbólum a koordináták $(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(k)})$ sorozatát jelenti. A pálya az egymást követő időpontokhoz tartozó helyzetek sorozata, és x_i vagy $(x_i^{(1)}, x_i^{(2)}, \dots, x_i^{(k)})$, azaz az egyes t_i időpontokhoz tartozó k koordináta mindegyikének értékét megadva jellemezhető. A dx_i szimbólum megállapodás-szerűen a k dimenziós konfigurációs tér térfogatelemét jelöli (a t_i időben). A posztulátumok kijelentései függetlenek a használt koordinátarendszertől.

A posztulátum arra szorítkozik, hogy a helymérések eredményeit definiálja. Nem mondja meg, miképpen definiálható pl. az impulzusmérés eredménye. Ez azonban valójában nem jelent korlátozást, minthogy elvben valamely részecske impulzusának mérése elvégezhető más részecskéken (pl. mérőműszereken) elvégzett helymérés útján. Elemelve ezen impulzusmérés céljából elvégzett kísérletet, ismereteket szerezhethetünk az első részecskére vonatkozóan.

4. Adott pályához tartozó valószínűségi amplitúdó kiszámítása

Az első posztulátum előírja a kvantummechanika kívánta matematikai keretet a valószínűségek kiszámítására. A második posztulátum sajátos tartalommal tölti meg e keretet, előírva, miként számíthatjuk ki a fontos Φ mennyiséget az egyes pályák esetében.

II. Az egyes pályák járuléka abszolútértékben egyenlő, járulékaik fázisát azonban a klasszikus hatás adja meg (\hbar -t egységül választva); vagy más szóval: a Lagrange-függvénynek a pálya mentén képezett időintegrálja.

Ez azt jelenti, hogy az adott $x(t)$ pálya $\Phi[x(t)]$ járuléka arányos $\exp(i/\hbar)S[x(t)]$ -vel, ahol az $S[x(t)] = \int L(\dot{x}(t), x(t)) dt$ hatás a klasszikus $L(\dot{x}, x)$ Lagrange-függvénynek a szóbanforgó pályára vonatkozóan képezett időintegrálja. A Lagrange-függvény, mely explicite is függhet az időtől, függvénye a helynek és sebességnek. Ha feltesszük, hogy $L(\dot{x}, x)$ a sebességek kvadratikusan függvénye, kimutathatjuk az itt megadott posztulátumok, valamint a kvantummechanika szokásos megfogalmazásának matematikai ekvivalenciáját.

Az első posztulátum értelmezése céljából elegendő volt a pályát csupán azon x_i pontok sorozata segítségével megadni, amelyeken a pálya a szukcesszív t_i időpontokban áthaladt. Az $S = \int L(\dot{x}, x) dt$ hatás kiszámításához a pálya minden pontját ismernünk kell, nem csupán az egyes x_i pontokat. Feltesszük, hogy az $x(t)$ függvény a t_i és t_{i+1} időpontokkal határolt közben az L Lagrange-függvénynek megfelelő azon klasszikus részecsepályával egyezik meg, amely a t_i időpontban x_i -ből kiindulva x_{i+1} -et t_{i+1} -ben éri el. Ez a feltevés ahhoz szükséges, hogy a második posztulátumot diszkontinuus pálya esetére értelmezhessek. A $\Phi(\dots x_i, x_{i+1} \dots)$ mennyiség, ha úgy tetszik (ε különböző értékei mellett), normálható, úgyhogy a bizonyos esemény valószínűségére $\varepsilon \rightarrow 0$ esetén egy adódjék.

Mindaddig, amíg L nem tartalmazza a helykoordináta elsőnél magasabb rendű időderiváltjait, a hatásintegrál kiszámítása során a sebességek hirtelen megváltozása a t_i időpontokban nem okoz nehézséget. Azonkívül hacsak L -re nem írjuk elő ezt a korlátozást, a végpontok megadása általában nem elégséges a klasszikus pálya meghatározására. Minthogy a klasszikus pálya tulajdonsága, hogy a hatást minimálissá teszi, írhatjuk:

$$S = \sum_i S(x_{i+1}, x_i), \quad (10)$$

ahol

$$S(x_{i+1}, x_i) = \min_{t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt. \quad (11)$$

Ezt az írásmódot használva, mindössze annyiban kell a klasszikus mechanikára hivatkoznunk, hogy az szolgáltatja számunkra a Lagrange-függvényt. Ténylegesen megtehetnénk azt is, hogy a második posztulátumot egyszerűen így fogalmazzuk meg: „ Φ exponenciális kifejezése egy valós függvény i -szeres időintegráljának; e valós függvény $x(t)$ -től és $\dot{x}(t)$ -től függ”. A klasszikus mozgásegyenletek azután makroszkopikus határesetként nyerhetők. Megmutatható, hogy x és \dot{x} mondott függvénye állandó tényezőtől eltekintve a klasszikus Lagrange-függvény.

Valójában a (10)-ben szereplő összeg — még véges ε -ra is — végtelen és így nincs értelme (ennek oka, hogy a teljes végtelen időtengelyre terjeszkedtünk ki). Ez a posztulátumok további fogyatkozását tükrözi vissza. Az időtengely véges, de tetszőleges hosszúságú szakaszára kell ezért szorítkoznunk.

A két posztulátumot kombinálva és a (10) egyenletet felhasználva kapjuk:

$$\varphi(R) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_R \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_i S(x_{i+1}, x_i) \right] \dots \frac{dx_{i+1}}{A} \frac{dx_i}{A} \dots; \quad (12)$$

itt a normalálási tényezőt minden egyes időpontnak megfelelően egy-egy $1/A$ faktorra bontottuk fel (ennek értékét rövidesen meghatározzuk). Az integráció az R tartományban fekvő x_i, x_{i+1}, \dots értékekre terjesztendő ki. Ez az egyenlet, $S(x_{i+1}, x_i)$ -nek (11) alatt megadott definíciója, és a fizikai értelmezés, mely szerint $|\varphi(R)|^2$ annak valószínűsége, hogy a részecskét R -ben találjuk meg, teljessé teszi a kvantummechanika általunk javasolt megfogalmazását.

5. A hullámfüggvény definíciója

Most rátérünk arra, hogy megmutassuk e posztulátumok és a kvantummechanika szokásos megfogalmazásának egyenértékűségét. Ezt két lépésben tesszük meg. A jelen szakaszban megmutatjuk, miképpen definiálható a hullámfüggvény az új nézőpont mellett. A következő szakaszban megmutatjuk, hogy ez a függvény eleget tesz *Schrödinger* differenciálegyenletének (hullámegyenletének).

Látni fogjuk, hogy a (10) tulajdonság, mely szerint S összeg és így Φ szorzat alakjában fejezhető ki (ahol az egyes tagok, ill. tényezők a pálya egymást követő szakaszainak járuléka), vezet el a hullámfüggvény tulajdonságaival rendelkező mennyiség bevezetésének lehetőségéhez.

Abból a célból, hogy ezt világossá tegyünk, gondoljuk el, hogy kiválasztva valamely t időt, az R tartományt (12)-ben részekre osztjuk, t -hez képest múltra és jövőre. Az R tartományt gondolatban a következő részekre osztjuk: (a) az R' tartományra, melynek térbeli kiterjedése tetszőleges módon korlátozott lehet, amely azonban az időben teljes egészében előtte fekszik valamely t' időpontnak: $t < t'$; (b) az R'' tartományra, melynek kiterjedését a térben bármily módon korlátozhatjuk, amely azonban teljes egészében t'' -nél később helyezkedik el: $t'' > t$; (c) a t' és t'' között fekvő tartományra, hol korlátozás nélkül felléphet az x koordináta minden értéke; ez tehát t' és t'' között az egész téridőt felöleli. A (c) tartományra nincs feltétlenül szükség. Időben oly szűknek választhatjuk, amilyennek csak akarjuk. Célszerű azonban megengedni, hogy t kissé változhasson anélkül, hogy ezzel együtt R' -t és R'' -t újra kellene definiálnunk. Ekkor $|\varphi(R', R'')|^2$ annak valószínűsége, hogy a pálya R' -be és R'' -be essék. Minthogy R' az időben teljes egészében korábban helyezkedik el, mint R'' , t -t tekintve jelennek, mondhatjuk: ez annak valószínűsége, hogy a pálya az R' tartományban haladt, és az R'' tartományban fog haladni. Ha osztva annak valószínűségével, hogy a pálya R' -ben helyezkedik el, renormáljuk a valószínűséget, mondhatjuk: $|\varphi(R', R'')|^2$ annak (feltételes) valószínűsége, hogy amennyiben a rendszer R' -ben volt, a jövőben R'' -ben lesz található.

Ez természetesen fontos mennyiség, mely lehetővé teszi, hogy kijelentéseket tegyünk a kísérletek kimenetelére vonatkozóan. A rendszert meghatározott módon preparáljuk (például: a rendszer a múltban R' -ben helyezkedett el), és megmérjük valamely más tulajdonságát (például: az R'' tartományban találjuk-e?). Mit mond (12): miként számíthatjuk ki ezt a mennyiséget, azaz inkább $\varphi(R', R'')$ -t, melyből a valószínűség abszolútérték-négyzet képzésével nyerhető?

Tegyük fel, hogy a t időpont a (12) alatt alkalmazott felosztás valamely meghatározott pontjának felel meg: $t = t_k$; a k index természetesen függ a felosztástól (ε -tól). Ekkor az exponenciális, melynek kitevőjében összeg áll, két tényező szor-

zata alakjában írható fel:

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i) \right] \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i) \right]. \quad (13)$$

Az első tényező k -nál nagyobb vagy azzal egyenlő, a második k -nál kisebb vagy azzal egyenlő indexű koordinátákat tartalmaz csak. Ez a felbontás a (10) egyenlet fennállásának folyamányaképpen lehetséges; (10) pedig lényegében annak következménye, hogy a Lagrange-függvény csak a helynek és a sebességnek a függvénye. Először elvégezhetjük az integrálást valamennyi $i > k$ indexű x_i változóra vonatkozóan az első tényezőben; így x_k valamely függvényét nyerjük, melyet még meg kell szoroznunk a második tényezővel. Ezután elvégezhetjük az $i < k$ indexű x_i változókra vonatkozó integrációt a második tényezőben, mely ugyancsak x_k -nak valamely függvényét szolgáltatja. Végül x_k -ra integrálhatunk. Így tehát $\varphi(R', R'')$ felírható mint két tényező szorzatának integrálja x_k szerint. Ezek jele legyen $\chi^*(x_k, t)$ és $\psi(x_k, t)$:

$$\varphi(R', R'') = \int \chi^*(x, t) \psi(x, t) dx, \quad (14)$$

ahol

$$\psi(x_k, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{R'} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_{k-1}}{A} \frac{dx_{k-2}}{A} \dots, \quad (15)$$

és

$$\chi^*(x_k, t) = \lim_{R''} \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{1}{A} \frac{dx_{k+1}}{A} \frac{dx_{k+2}}{A} \dots \quad (16)$$

Az R' szimbólum a ψ -t előállító integrál esetében azt jelzi, hogy a koordináták szerint az R' tartományra kell integrálnunk, a t' és t közé eső t_i esetében pedig az egész térre. Hasonlóképpen a χ^* -ot megadó integrált R'' -re kell képeznünk, ill. a t és t'' közé eső idők mellett az egész térre. A χ^* esetében a csillag komplex-konjugálást jelent; látni fogjuk ugyanis, hogy célszerűbb, ha (16)-ot mint valamely χ mennyiség komplex-konjugáltját definiáljuk.

A ψ mennyiség csupán a t -nél korábbi R' tartománytól függ, és teljesen meg van határozva, ha ez a tartomány ismert. Attól, hogy mi lesz a rendszerrel a t idő után, semmilyen módon nem függ. Az utóbbi információt egyedül χ foglalja magában. Így tehát ψ -t és χ -t bevezetve szeparáltuk a rendszer múltbeli történetét a jövőben bekövetkező sorsától. Ez lehetővé teszi számunkra, hogy a múlt és a jövő viszonyáról a szokott módon beszéljünk. Így ha a részecske az R' téridő-tartományban tartózkodott, úgy azt mondhatjuk, hogy a t időpontban meghatározott feltételek között vagy állapotban van, melyet egyedül a részecske múltja határoz meg, és amelyet a $\psi(x, t)$ ún. hullámfüggvény ír le. Ez a függvény magában foglal mindent, ami ahhoz szükséges, hogy előre megmondjuk a jövőbeli valószínűségeket. Tegyük fel ugyanis, hogy egy másik esetben R' -t egy másik r' tartománnyal helyettesítettük, s a Lagrange-függvényt a t -nél korábbi időkre ugyancsak megváltoztattuk. Tegyük fel, hogy mindazonáltal a (15) képlet ugyanazt a mennyiséget szolgáltatja. Ekkor (14) szerint annak valószínűsége, hogy a rendszert végül is az adott R'' tartományban találjuk, R' mellett ugyanakkora, mint r' mellett. Eszerint a jövőben elvégzett kísérletekkel nem dönthető el, a rendszer R' -ben tartózkodott-e,

vagy r' -ben. A $\psi(x, t)$ hullámfüggvény önmagában elégséges ahhoz, hogy megadja azokat a jellemzőket, amelyek — a múltbeli történet alapján — meghatározzák a rendszer viselkedését a jövőben.

Hasonlóképpen a $\chi^*(x, t)$ függvény jellemzi a rendszer jövő sorsát, vagy mondjuk a kísérletet, melyet majd a rendszeren elvégeztünk. Ha egy más r'' tartományt, s a t -nél későbbi időkre egy más Lagrange-függvényt választva, a (16) egyenletből ugyanaz a $\chi^*(x, t)$ adódnék, mint az eredeti R'' mellett, úgy a preparálás módjától (ψ -től) függetlenül mindenkor ugyanakkora annak valószínűsége, hogy a rendszert R'' -ben találjuk, mint az r'' -nek megfelelő valószínűség. A két „kísérlet” (R'' és r'') egyenértékű, minthogy ugyanazt az eredményt szolgáltatják. Pongyolán szólva azt mondjuk: e kísérletek annak eldöntésére szolgálnak, milyen valószínűséggel tartózkodik a rendszer a $\chi(x, t)$ állapotban. Valójában ez a terminológia nem megfelelő. A rendszer valójában a ψ állapotban van. Annak oka, hogy valamely kísérletnek meg lehet feleltetni egy állapotot, természetesen az, hogy egy ideális kísérlet esetében egyetlen olyan állapot található [ennek hullámfüggvénye $\chi(x, t)$], amelynek esetében a kísérlet bizonyosan pozitív eredményre vezet.

Mondhatjuk tehát: annak valószínűségét, hogy a ψ állapotban tartózkodó rendszer esetében valamely kísérlet, melynek karakterisztikus állapota χ , pozitív eredményt adjon (vagy pongyolábban szólva, annak valószínűségét, hogy a rendszert, mely a ψ állapotban tartózkodik, a χ állapotban találjuk), az

$$\left| \int \chi^*(x, t) \psi(x, t) dx \right|^2 \quad (17)$$

kifejezés adja meg.

Ezek az eredmények természetesen összhangban vannak a közönséges kvantummechanika elveivel. Következményei annak a ténynek, hogy a Lagrange-függvény csak a helynek, a sebességnek és az időnek függvénye.

6. A hullámegyenlet

Ahhoz, hogy az itt adott és a szokásos megfogalmazás ekvivalenciájának bizonyítása teljessé váljék, meg kell mutatnunk: az előző szakaszban (15) alatt definiált hullámfüggvény ténylegesen eleget tesz a Schrödinger-féle hullámegyenletnek. Mint látni fogjuk, ezt abban az esetben fogjuk tudni kimutatni, amikor (11)-ben az L Lagrange-függvény az $\dot{x}(t)$ sebességnek — esetleg inhomogén — kvadrátikus függvénye. Ez nem jelent azonban korlátozást, minthogy ez mindazon esetekben így van, amelyekre a Schrödinger-egyenletet kísérletileg igazolták.

A hullámegyenlet írja le a hullámfüggvény változását az időben. Kiindulásképpen jegyezzük meg, hogy véges ε mellett (15) alapján egyszerű rekurziós összefüggést nyerhetünk. Miképpen fest a (15) egyenlet, ha ψ -t a következő, $t + \varepsilon$ időpontra kívánjuk kiszámítani? Írhatjuk:

$$\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) = \int_R \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^k S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_k}{A} \frac{dx_{k-1}}{A} \dots \quad (15')$$

Ez hasonló (15)-höz; eltérést csupán az új x_k változóra vonatkozó integrálás és a kitevőben fellépő járulékos tag jelent. Ezen tag fellépte azt jelenti, hogy a (15') integrálban álló kifejezés az $(1/A) \exp(i/\hbar) S(x_{k+1}, x_k)$ tényezőtől eltekintve meg-

egyezik a (15) integrálban állott kifejezéssel. Minthogy ez a tényező az $i < k$ indexű x_i változók egyikét sem tartalmazza, a megfelelő dx_i -k szerint (egészen dx_{k-1} -ig) e tényezőt figyelmen kívül hagyva integrálhatunk. Ezen integrálások eredménye (15) értelmében egyszerűen $\psi(x_k, t)$. Így tehát (15')-ből nyerjük a

$$\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_{k+1}, x_k) \right] \psi(x_k, t) dx_k / A \quad (18)$$

összefüggést. Ez az összefüggés, mely megadja ψ változását az időben, mint egyszerű példákön látni fogjuk, A alkalmas választása mellett ekvivalens a Schrödinger-egyenlettel. Valójában a (18) egyenlet nem teljesül szigorúan, hanem csak az $\varepsilon \rightarrow 0$ határesetben igaz; a Schrödinger-egyenletet azon feltevés alapján fogjuk levezetni, hogy (18) egyenletnek csupán kis ε -ra, az ε -ban elsőrendű tagokig *kell* teljesülnie. Ha ugyanis (15)-ben valamely véges T intervallumot áthidaló tényezőket veszünk szemügyre, e tényezők száma T/ε lesz. Ha mindegyikükben ε^2 nagyságrendű hibát követünk el, a felgyülemelő eredő hiba nem fogja felülmúlni $\varepsilon^2(T/\varepsilon) = T\varepsilon$ nagyságrendjét, ami $\varepsilon \rightarrow 0$ esetén eltűnik.

A (18) összefüggés viszonyát a Schrödinger-egyenlethez oly módon világítjuk meg, hogy azt egy részecskének a $V(x)$ potenciál hatása alatt végzett egydimenziós mozgására alkalmazzuk. Mielőtt azonban ezt megtennénk, szeretnénk a (11)-beli $S(x_{i+1}, x_i)$ néhány közelítésével foglalkozni, melyek a (18) kifejezés céljára megfelelnek.

Az $S(x_{i+1}, x_i)$ számára (11) alatt megadott kifejezést nehéz egzaktul kiszámítani tetszőleges ε -ra a klasszikus mechanika alapján. Ténylegesen csupán arra van szükség, hogy $S(x_{i+1}, x_i)$ valamely közelítő kifejezését használjuk fel (18)-ban, feltéve, hogy a közelítés hibája az ε -ban elsőrendű mennyiségeknél egy nagyságrenddel kisebb. Arra az esetre szorítkozunk, amikor a Lagrange-függvény az $\dot{x}(t)$ sebességeknek — esetleg inhomogén — kvadrátikus alakja. Amint később látni fogjuk, azoknak a pályáknak van jelentőségük, amelyek esetében $x_{i+1} - x_i$ nagyságrendben $\varepsilon^{1/2}$ -nel egyenlő. E feltételek mellett elegendő, ha a (11)-beli integrált a *szabad* részecske által befutott klasszikus pálya mentén számítjuk ki [11].

Descartes-koordinátákban [12] a szabad részecske pályája egyenes, így a (11) integrált egyenes mentén képezhetjük. E feltételek mellett elegendő pontosságot jelent, ha az integrált a trapéz-szabályból adódó

$$S(x_{i+1}, x_i) = \frac{\varepsilon}{2} L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_{i+1} \right) + \frac{\varepsilon}{2} L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_i \right) \quad (19)$$

kifejezéssel helyettesítjük; vagy ha az célszerűbbnek bizonyul, írható:

$$S(x_{i+1}, x_i) = \varepsilon L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \right). \quad (20)$$

Mindez általános (pl. gömbi) koordinátarendszer használata mellett nem érvényes. Még egyszerűbb közelítés használható, ha még azt is tudjuk, hogy nincs jelen vektorpotenciál vagy más, a sebességben lineáris tag (lásd 183. old.):

$$S(x_{i+1}, x_i) = \varepsilon L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_{i+1} \right). \quad (21)$$

Pl. a $V(x)$ potenciál hatása alatt egy dimenzióban mozgó m tömegű részecske egyszerű esetében pl. írható:

$$S(x_{i+1}, x_i) = \frac{m\varepsilon}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right)^2 - \varepsilon V(x_{i+1}). \quad (22)$$

E speciális esetben a (18) képletet így írhatjuk:

$$\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) = \int \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_{k+1}) \right\} \right] \psi(x_k, t) dx_k / A. \quad (23)$$

Legyen $x_{k+1} = x$, $x_{k+1} - x_k = \xi$ és így $x_k = x - \xi$. Ekkor (23) helyett kapjuk:

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \int \exp \frac{im\xi^2}{\varepsilon \cdot 2\hbar} \exp \frac{-i\varepsilon V(x)}{\hbar} \psi(x - \xi, t) \frac{d\xi}{A}. \quad (24)$$

A ξ -re vonatkozó integrál konvergál, ha $\psi(x, t)$ elég gyorsan csökken nagy x -re ($\int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$ esetén bizonyos a konvergencia). Ha ξ szerint integrálunk, úgy — miután ε igen kicsiny — az $im\xi^2/2\hbar\varepsilon$ argumentum exponenciális függvénye rendkívül gyorsan oszcillál, kivéve a $\xi=0$ hely környezetébe eső tartományt [e tartomány kiterjedése $(\hbar\varepsilon/m)^{\frac{1}{2}}$ nagyságrendű]. Minthogy $\psi(x - \xi, t)$ viszonylag sima függvénye ξ -nek (és minthogy ε oly kicsinynek választható, amilyen kicsinynek csak akarjuk), az a tartomány, ahol az exponenciális gyorsan oszcillál, nagyon kicsiny járulékot szolgáltat csak; a pozitív és a negatív járulékok egymást csaknem teljesen lerontják. Minthogy csak a kicsiny ξ -eknek van lényeges szerepük, $\psi(x - \xi, t)$ Taylor-sorba fejthető. Így

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \varepsilon) = & \exp \left(\frac{-i\varepsilon V(x)}{\hbar} \right) \int \exp \left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon} \right) \left[\psi(x, t) - \xi \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - \dots \right] \frac{d\xi}{A}. \end{aligned} \quad (25)$$

Fennáll

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(im\xi^2/2\hbar\varepsilon) d\xi &= (2\pi\varepsilon i/m)^{\frac{1}{2}}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(im\xi^2/2\hbar\varepsilon) \xi d\xi &= 0, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(im\xi^2/2\hbar\varepsilon) \xi^2 d\xi &= (\hbar\varepsilon i/m) (2\pi\hbar\varepsilon i/m)^{\frac{1}{2}}; \end{aligned} \quad (26)$$

a ξ^3 -t tartalmazó integrál eltűnik, minthogy integrandusa — hasonlóan a ξ -t tartalmazóhoz — páratlan függvény; a ξ^4 -t tartalmazó integrál legalább is egy ε nagyságrendű faktoriall kisebb, mint a kiírt tagok [13]. A bal oldalt ε -ban elsőrendű tagokig sorbafejtve (25)-ből nyerjük:

$$\psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \exp \left(\frac{-i\varepsilon V(x)}{\hbar} \right) \frac{(2\pi\hbar\varepsilon i/m)^{\frac{1}{2}}}{A} \left[\psi(x, t) + \frac{\hbar\varepsilon i}{m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \dots \right]. \quad (27)$$

Abból a célból, hogy a két oldalon az ε -ban *nulladrendű* tagok megegyezzenek, az

$$A = (2\pi\hbar\epsilon i/m)^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

egyenletnek kell teljesülnie. A $V(x)$ -et tartalmazó exponenciális kifejtésével nyerjük:

$$\psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x)\right) \left(\psi(x, t) + \frac{\hbar\epsilon i}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right). \quad (29)$$

Áthúzva $\psi(x, t)$ -t mind a két oldalon, összehasonlítva az ε -ban elsőrendű tagokat és $-\hbar/i$ -vel szorozva kapjuk:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi + V(x)\psi; \quad (30)$$

ez a szóban forgó probléma Schrödinger-egyenlete.

A χ^* -ra vonatkozó egyenlet hasonlóképpen származtatható le, itt azonban olyan járulékos faktor lép fel, mely egy lépéssel *csökkenti* az időtengelymenti integrációs tartományt; így χ^* a (30)-hoz hasonló egyenletnek tesz eleget, csupán a t idő kap ellentett előjelet. Komplex-konjugálást alkalmazva levonhatjuk a következtetést, hogy χ ugyanazon egyenletnek tesz eleget, mint ψ ; a χ állapot segítségével definiálható tehát egy kísérlet, melynek éppen ez az állapot felel meg [14].

Ez a példa mutatja, hogy $\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon)$ kifejezéséhez legnagyobbbrészt azon x_k -knak megfelelő $\psi(x_k, t)$ értékek járulnak hozzá, amelyek közel vannak x_{k+1} -hez ($\varepsilon^{\frac{1}{2}}$ nagyságrendű távolságra). Így a (23) integrálegyenlet határátmenet után differenciálegyenlettel helyettesíthető. Azok az $(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ „sebességek”, amelyek fontos szerepet játszanak, igen nagyok: $(\hbar/m\varepsilon)^{\frac{1}{2}}$ nagyságrendűek, mely érték $\varepsilon \rightarrow 0$ esetén divergál. A pályák, melyek szerepet játszanak, ennél fogva folytonosak, de deriváltjuk nem létezik. A pályák e fajtája ismert a Brown-mozgás vizsgálatából.

E nagy sebességek szükségessé teszik, hogy óvatosan járjunk el, ha $S(x_{k+1}, x_k)$ -t (11)-ből kiindulva kívánjuk megközelíteni [15]. Ha $V(x_{k+1})$ -et $V(x_k)$ -val helyettesítünk, ez természetesen azt jelentené, hogy (18)-ban a kitevőt $i\varepsilon[V(x_k) - V(x_{k+1})]/\hbar$ -sal helyettesítjük, ami $\varepsilon(x_{k+1} - x_k)$ nagyságrendű, s így csak kevésbé lényeges, ε -nál magasabb rendű tagok felléptét eredményezi (29) jobb oldalán. Ez az oka annak, hogy (20) és (21) egyaránt kielégítő megközelítést adják $S(x_{i+1}, x_i)$ -nek, ha vektorpotenciál nincs jelen. A vektorpotenciáltól származó, a sebességben lineáris $A\dot{x}dt$ tag gondosabb kezelést igényel. Ekkor az $S(x_{k+1}, x_k)$ -ban fellépő $A(x_{k+1})(x_{k+1} - x_k)$ mennyiség $A(x_k)(x_{k+1} - x_k)$ -tól egy $(x_{k+1} - x_k)^2$, azaz ε nagyságrendű tagban különbözik. Egy ilyen tag az eredményként adódó hullámeqyenletben változást eredményezne. A (21) közelítés ennél fogva nem elég pontosan közelíti meg (11)-et, és így a (20) [vagy az attól ε -ban magasabb rendű tagokban különböző (19)] típusú közelítés használandó. Ha A a vektorpotenciál és $\mathbf{p} = (\hbar/i)\nabla$ az impulzusoperátor, úgy (20) az $(1/2m)(\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}) \cdot (\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A})$, (21) pedig az $(1/2m)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} - (2e/c)\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + (e^2/c^2)\mathbf{A} \cdot \mathbf{A})$ tagot szolgáltatja a Hamilton-operátorhoz. E két kifejezés különbsége $(\hbar e/2imc)\nabla \cdot \mathbf{A}$, ami nem feltétlenül zérus. E kérdés még fontosabb olyan tagok együtthatói esetében, amelyek kvadratikusak a sebességekben. E tagokban (19) és (20) általában nem szolgáltatja (11) elég pontos előállítását. Akkor használható (19) és (20) a (11) kifejezés helyettesítésére, ha az együtthatók állandók. Ha pl. a (19)-hez hasonló kifejezést használunk mondjuk gömbi koordináták esetében,

amikor is az nem szolgáltatja (11) kielégítő közelítését, olyan Schrödinger-egyenletet nyerünk, melyben az impulzus-operátorok és koordináták helytelen sorrendben szerepelnek. A (11) egyenlet ekkor a többértelműséget a szokásos szabály segítségével szünteti meg, mely p -nek és q -nak a $H(p, q)$ klasszikus Hamilton-függvényben a $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$ és q nem-felcserélhető mennyiségekkel való helyettesítésére vonatkozik.

Világos, hogy a (11) kijelentés független a koordináta-rendszer-től. Eszerint a differenciálegyenletet, melyet az szolgáltat, tetszőleges koordináta-rendszerben a legkönnyebben úgy kaphatjuk meg, hogy először meghatározzuk az egyenleteket Descartes-koordinátákban, azután transzformációval áttérünk a kívánt koordináta-rendszerre. Elegendő tehát, ha a posztulátumok és a Schrödinger-egyenlet viszonyát derékszögű koordináták választása mellett világítjuk meg.

Az egydimenzióra itt adott levezetés közvetlenül kiterjeszthető tetszőleges K számú részecske Descartes-koordinátái esetére, melyek potenciál segítségével leírható kölcsönhatásban állnak, és vektorpotenciállal leírt mágneses térben mozognak. A vektorpotenciált tartalmazó tagok esetében a kitevőt a Gauss-féle integrálok kiszámításánál szokott módon teljes négyzetté kell kiegészítenünk. Az x változó helyére az $x^{(1)}$ -től $x^{(3K)}$ -ig terjedő sorozat lép, ahol $x^{(1)}$, $x^{(2)}$, $x^{(3)}$ az első, m_1 tömegű részecske koordinátái, $x^{(4)}$, $x^{(5)}$, $x^{(6)}$ a második részecskét jellemzik, melynek tömege m_2 , s.í.t. A dx szimbólum helyét $dx^{(1)}dx^{(2)} \dots dx^{(3K)}$ foglalja el, és a dx szerint képezett integrál helyett most $3K$ -szoros integrál képezendő. Az A állandó értéke ebben az esetben $A = (2\pi\hbar ei/m_1)^{3/2} (2\pi\hbar ei/m_2)^{3/2} \dots (2\pi\hbar ei/m_K)^{3/2}$. A Lagrange-féle operátor ebben az esetben ugyanezen probléma klasszikus Lagrange-függvényével egyezik meg, a kiadódó Schrödinger-egyenlet pedig az ezen Lagrange-függvényből nyerhető klasszikus Hamilton-függvénynek felel meg. Tetszőleges más koordináta-rendszerre vonatkozóan az egyenletek transzformáció útján nyerhetők. Minthogy a fentiek felölelik mindazokat az eseteket, amelyekre a Schrödinger-egyenlet kísérletileg igazolást nyert, azt mondhatjuk, hogy posztulátumaink alkalmasak mindannak leírására, amit a nem-relativisztikus kvantummechanika segítségével — elhanyagolva a spint — le lehetett írni.

7. A hullámegyenlet diszkusziója

A klasszikus határeset

Ezzel teljessé vált az új és a régi megfogalmazás ekvivalenciájának kimutatása. Ebben a szakaszban néhány megjegyzést szeretnénk tenni az alapvető fontosságú (18) egyenletről.

Ez az egyenlet megadja a hullámfüggvény megváltozását valamely kicsiny időköz folyamán. Fizikai értelmezését könnyű megadni; az egyszerűen Huygens elvét fejezi ki az anyaghullámokra vonatkozóan. A geometriai optikában a sugarak, amelyek valamely inhomogén közegben haladnak, a minimális idő Fermat-féle elvét teljesítik. Huygens elvét a hullámoptikában így fogalmazhatjuk meg. Ha a hullám amplitúdója adott felületen ismert, valamely közel fekvő pontban az amplitúdó felfogható mint a felület valamennyi pontjától eredő járulékok összege. Az egyes járulékok fázisa azon idővel arányosan késleltetett, amelyre a fénynek szüksége volna ahhoz, hogy a felületről eljusson az adott pontban a minimális időnek meg-

felelő geometriai optikai sugár mentén. Analóg módon szemlélhető (22), a klasszikus vagy „geometriai” mechanika első Hamilton-féle elvéből, a legkisebb hatás elvéből kiindulva. Ha a ψ hullám amplitúdója ismert adott „felületen”, speciálisan azon a „felületen”, amelyet az összes x alkot adott t mellett, úgy ψ értéke valamely közel-fekvő pontban és a $t + \varepsilon$ időben összege a t -beli felület összes pontjaiból származó járulékoknak. Az egyes járulékok fázisa ama *hatással* arányosan késleltetett, amelyre az adott pont eléréséhez szükség volna, a felületről kiindulva, a klasszikus mechanika legkisebb *hatásnak* megfelelő pályája mentén [16].

Valójában *Huygens* elve az optikában nem helytálló. Helyét *Kirchoff* módosítása foglalja el, mely azt kívánja, hogy mind az amplitúdót, mind annak deriváltját ismerni kell a szomszédos felületen. Ez annak következménye, hogy az optika hullámegyenlete időben másodrendű. A kvantummechanika hullámegyenlete időben elsőrendű; *Huygens* elve ennél fogva az anyaghullámokra helytálló, amennyiben az időt a hatással helyettesítjük.

Összehasonlítható matematikailag az egyenlet az eredeti megfogalmazásokban szereplő mennyiségekkel is. *Schrödinger* leírás módjában a hullámfüggvény változását az időben

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi \quad (31)$$

adja meg, melynek megoldása (időtől független \mathbf{H} esetén tetszőleges ε -ra)

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \exp(-i\varepsilon \mathbf{H}/\hbar) \psi(x, t). \quad (32)$$

A (18) egyenlet ennél fogva az $\exp(-i\varepsilon \mathbf{H}/\hbar)$ operátort egy kis ε -ra érvényes közelítő integráloperátor segítségével fejezi ki.

Heisenberg nézőpontjából tekintve pl. a t időbeli helykoordinátát mint valamely \mathbf{x} operátort fogjuk fel. A későbbi $t + \varepsilon$ időpontnak megfelelő \mathbf{x}' helyzet a t időbeli \mathbf{x} -szel az

$$\mathbf{x}' = \exp(i\varepsilon \mathbf{H}/\hbar) \mathbf{x} \exp(-i\varepsilon \mathbf{H}/\hbar) \quad (33)$$

módon fejezhető ki. *Dirac* transzformációelmélete lehetőséget nyújt arra, hogy a $t + \varepsilon$ időhöz tartozó $\psi(\mathbf{x}', t + \varepsilon)$ hullámfüggvényt az állapot reprezentánsának tekintsük egy olyan reprezentációban, amelyben \mathbf{x}' diagonális; $\psi(\mathbf{x}, t)$ ugyanezt az állapotot abban a reprezentációban írja le, amelyben \mathbf{x} diagonális. Kapcsolatot köztük ennél fogva az $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle$ transzformációs függvény teremti, mely e reprezentációkat a

$$\psi(\mathbf{x}', t + \varepsilon) = \int \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle_e \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

képletnek megfelelően kapcsolja össze. A (18) egyenlet tartalma eszerint az, hogy megmutatja: kicsiny ε -ra

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle_e = (1/A) \exp(iS(\mathbf{x}', \mathbf{x})/\hbar) \quad (34)$$

írható, ahol $S(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ -et (11) adja meg.

Az $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle_e$ és $\exp(iS(\mathbf{x}', \mathbf{x})/\hbar)$ között fennálló szoros analógiára *Dirac* több alkalommal rámutatott [1]. Ténylegesen most látjuk, hogy a két mennyiség kielégítő közelítésben arányosnak vehető. *Dirac* megjegyzései kiindulópontját képezték jelen fejtegetéseinknek. Az észrevételek, melyeket a $\hbar \rightarrow 0$ klasszikus határesetre

való áttéréssel kapcsolatosan tett, igen szépek, és talán elnézi nekem az olvasó, ha itt azokat röviden áttekintem.

Először is megjegyezzük, hogy a hullámfüggvény az x'' pontban és a t'' időben megkapható az x' és t' értékeknek megfelelő hullámfüggvényből:

$$\psi(x'', t'') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \psi(x', t') \frac{dx_0}{A} \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_{j-1}}{A}; \quad (35)$$

itt $x_0 \equiv x'$ és $x_j \equiv x''$, $j\varepsilon = t'' - t'$ (feltesszük, hogy a t' és a t'' idő között az integráció tartományára nincs kiróva korlátozás). Ez vagy (18) ismételt alkalmazásával látható be, vagy közvetlenül (15) segítségével. Tegyük fel a kérdést: ha $\hbar \rightarrow 0$, a közbelső x_i koordináták mely értékei járulnak hozzá a legnagyobb mértékben az integrálhoz? Ezek az értékek azok, amelyek valamely kísérletben a legnagyobb valószínűséggel adódnak, és így határesetben ezek határozzák meg a klasszikus pályát. Ha \hbar igen kicsiny, a kitevő valamennyi x_i változónak igen gyorsan változó függvénye lesz. Amint x_i változik, a kitevő pozitív és negatív járuléka közelítőleg leontják egymást. A tartományt, melyben x_i a legnagyobb mértékben járul hozzá az integrálhoz, az jellemzi, hogy ott az exponensben álló fázis a legkevésbé változik x_i -vel (a stacionárius fázis módszere). Jelölje a kitevőben álló összeget S ; írjuk:

$$S = \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i). \quad (36)$$

A klasszikus pálya közelítőleg azon x_i pontokon halad át, amelyekben S változása x_i -vel kicsiny, ill. $\hbar \rightarrow 0$ esetén zérus; a klasszikus pálya eszerint azokon a pontokon halad át, ahol $\partial S / \partial x_i = 0$ minden x_i -re. Az $\varepsilon \rightarrow 0$ határesetben (36) helyett (11) alapján írható:

$$S = \int_{t'}^{t''} L(\dot{x}(t), x(t)) dt. \quad (37)$$

Láthatjuk: a klasszikus pályát az jellemzi, hogy a (37) integrál nem szenved változást első rendben, ha a pályát variáljuk. Ez *Hamilton* elve, mely közvetlenül elvezet a *Lagrange-féle mozgásegyenlethez*.

8. Operátoralgebra

Mátrixelemek

Ha egyszer a hullámfüggvény és a Schrödinger-egyenlet meg van adva, természetesen az operátor- vagy mátrixalgebra egész apparátusa kiépíthető. Meglehetősen érdekesnek bizonyul azonban e fogalmakat némileg eltérő nyelven kifejezni, mely szorosabb kapcsolatban áll a posztulátumok megfogalmazására fent használt kifejezésmóddal. Ami az operátoralgebra kifejtését illeti, ezáltal nem sokat nyerünk. Az eredmények egyszerűen átírását jelentik az egyszerű operátoregyenleteknek egy valamivel bonyolultabb jelölésmódba. Másrésztől azonban az új jelölésmód és nézőpont igen hasznos egyes, a bevezetésben leírt alkalmazások esetében. Az egyenletek alakja lehetővé teszi továbbá, hogy kiterjeszkedjünk az operátoroknak a szokásosan vizsgálnál bővebb osztályára (pl. olyan operátorokra, melyek két vagy

több különböző időpontra vonatkozó mennyiségeket tartalmaznak). Ha lehetséges valamiféle általánosítás a hatásfunkcionálok bővebb osztályára, úgy a lezármaztatandó képletek fontos szerepet fognak majd játszani.

E kérdéseket a következő három szakaszban tárgyaljuk. Ebben a szakaszban főként definíciókat adunk meg. Definálunk egy mennyiséget, melyet két állapotot összekötő átmeneti elemnek nevezünk. Az lényegében véve egy mátrixelem. Ez a mátrixelem azonban nem *ugyanazon* időponthoz tartozó ψ és χ állapotokat köt össze, hanem két olyan állapotot, amelyek különböző időpontoknak felelnek meg. A következő szakaszban levezetünk egy alapvető összefüggést az átmeneti elemek között, melyből a koordináta és impulzus szokásos felcserélési szabályai megkaphatók. Ugyanez az összefüggés megadja a Newton-egyenletek mátrixalakját is. Végül a 10. szakaszban a Hamilton-operátor és az időtengely mentén végrehajtott eltolás operátorának kapcsolatát tárgyaljuk.

Azzal kezdjük, hogy megadjuk az átmeneti elem definícióját, kiindulva az adott állapotból valamely másik állapotba vezető átmeneti valószínűségéből. Pontosabban szólva feltesszük, hogy hasonló helyzettel állunk szemben, mint a (17) képlet levezetése esetében. Az R tartomány álljon a t' -nél korábban elhelyezkedő R' tartományból, t' és t'' között az egész térből, és t'' után az R'' tartományból. Foglalkozunk annak valószínűségével, hogy a rendszert, mely korábban R' -ben helyezkedett el, később R'' -ben találjuk meg. Ezt a valószínűséget (17) adja meg. Ebben a szakaszban azt vizsgáljuk meg, miképpen változik ez meg, ha a Lagrange-függvény alakját t' és t'' között megváltoztatjuk. A 10. szakaszban azt fogjuk meg tárgyalni, hogy milyen a változás, ha az R' preparálásban vagy az R'' kísérletben történik változás.

Az állapotot a t' időpontban teljesen meghatározza az R' preparálás. Azt jellemezhetjük egy $\psi(x', t')$ hullámfüggvény segítségével, mely a (15) minta szerint kapható, az integrálás azonban itt csak a t' időpontig terjedhet. Hasonlóképpen a kísérletet jellemző állapot (az R'' tartomány) definiálható a (16)-ból adódó $\chi(x'', t'')$ függvény segítségével, ahol az integrálás a t'' -t követő időkre terjed ki. A t'' időponthoz tartozó $\psi(x'', t'')$ hullámfüggvény természetesen megkapható (15)-öt megfelelő módon felhasználva. Megkapható $\psi(x', t')$ -ből is (35) segítségével. A (17) képlet szerint, ha abban t helyett t'' -t írunk, annak valószínűsége, hogy a kísérlet χ -t adja, amennyiben a preparálás eredménye ψ volt, abszolútérték-négyzete az $\int \chi^*(x'', t'')\psi(x'', t'')dx''$ mennyiségnek, melyet átmeneti amplitúdónak fogunk nevezni. Ezt χ -nek t'' és ψ -nek t' időpontbeli értékeivel kívánjuk kifejezni. Ezt (35) segítségével tehetjük meg. Eszerint annak valószínűsége, hogy a rendszert, mely a t' időpontban elvégzett preparáláskor a $\psi_{t'}$ állapotba került, később valamely t'' időpontban a $\chi_{t''}$ állapotban találjuk, a

$$\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_S = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \chi^*(x'', t'') \exp(iS/\hbar) \psi(x', t') \frac{dx_0}{A} \dots \frac{dx_{j-1}}{A} dx_j \quad (38)$$

átmeneti amplitúdó abszolútérték-négyzete; itt a (36) rövidítést alkalmaztuk.

A szokásos kvantummechanika nyelvén azt mondhatjuk: ha a \mathbf{H} Hamilton-operátor állandó, úgy $\psi(x, t'') = \exp[-i(t'' - t')\mathbf{H}/\hbar]\psi(x, t')$ és így (38) az $\exp[-i(t'' - t')\mathbf{H}/\hbar]$ operátor mátrixeleme a $\chi_{t''}$ és $\psi_{t'}$ állapotok között.

Legyen F az x_i koordináták tetszőleges függvénye $t' < t_i < t''$ mellett. Defináljuk F átmeneti elemét a t' -beli ψ és a t'' -beli χ állapotok között, az S hatás kifejezésében az $x'' \equiv x_j, x' \equiv x_0$ választással élve:

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \chi^*(x'', t'') F(x_0, x_1, \dots, x_j) \times \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \psi(x', t') \frac{dx_0}{A} \dots \frac{dx_{j-1}}{A} dx_j. \end{aligned} \quad (39)$$

Az $\varepsilon \rightarrow 0$ határesetben F az $x(t)$ pálya funkcionálja.

Nyomban látni fogjuk, miért fontosak az ilyen mennyiségek. Ezt könnyebb lesz megérteni, ha most egy pillanatra megállunk és megállapítjuk, minek felelnek meg e mennyiségek a szokásos jelölésben. Tegyük fel, hogy F egyszerűen x_k -val egyenlő, ahol k valamely $t = t_k$ időpontot jelez. Ekkor (39) jobb oldalán az integrálás x_0 -tól x_{k-1} -ig elvégezhető; ily módon $\psi(x_k, t)$ vagy $\exp[-i(t-t')\mathbf{H}/\hbar]\psi_{t'}$ adódik. Hasonlóképpen az x_i -re ($j \geq i > k$) vonatkozó integrál a $\chi^*(x_k, t)$ vagy $\{\exp[-i(t''-t) \cdot \mathbf{H}/\hbar]\chi_{t''}\}^*$ eredményt adja. Eszerint x_k

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S &= \int \chi_{t''}^* e^{-(i/\hbar)\mathbf{H}(t''-t)} x e^{-(i/\hbar)\mathbf{H}(t-t')} \psi_{t'} dx = \\ &= \int \chi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \end{aligned} \quad (40)$$

átmeneti eleme megegyezik x mátrixelemével a $t = t_k$ időpontban azon állapotok között, melyek egyike a t' -beli $\psi_{t'}$ -ből alakulna ki t -re, másika pedig a t időpontból kiindulva a t'' -beli $\chi_{t''}$ -be fejlődne. Így tehát $x(t)$ -nek e két állapotot összekötő mátrixeleme áll előttünk.

Hasonlóképpen (39) alapján a $F = x_{k+1}$ választással x_{k+1} átmeneti elemét képezve $\mathbf{x}(t+\varepsilon)$ mátrixelemét nyerjük. Ha $F = (x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ átmeneti elemét képezzük, $(\mathbf{x}(t+\varepsilon) - \mathbf{x}(t))/\varepsilon$ vagy $i(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{H})/\hbar$ mátrixeleme adódik, mint az (40) felhasználásával könnyen megmutatható. Ezt nevezhetjük az $\dot{x}(t)$ sebesség mátrixelemének.

Tegyük fel, hogy egy második problémát veszünk szemügyre, mely az első-től pl. abban különbözik, hogy a potenciált valamely kicsiny $U(\mathbf{x}, t)$ mennyiség hozzáadásával megnöveltük. Ekkor az új problémában S helyét az $S' = S + \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i)$ mennyiség foglalja el. Ezt (38)-ba helyettesítve kapjuk:

$$\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_{S'} = \langle \chi_{t''} | \exp \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^j U(x_i, t_i) | \psi_{t'} \rangle_S. \quad (41)$$

Eszerint a (39)-hez hasonló átmeneti elemek abban az esetben játszanak fontos szerepet, amikor F valamiféleképpen a hatás kifejezésének δS megváltozásából származik. Nevezzük fizikai funkcionálnak azon F funkcionálokat, amelyek (esetleg közvetlenül) az S hatás variációja következtében fellépő változások segítségével definiálhatók. A feltétel, hogy valamely funkcionál fizikai legyen, némiképp hasonló egy operátor hermitikus jellegét posztuláló feltételhez. A fizikai funkcionálok korlátozott osztályt képeznek, minthogy a hatásnak a sebességekben kvadratikusan

kell lennie. Valamely fizikai funkcionálból továbbiak kaphatók. Pl.

$$\langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_{S'} = \langle \chi_{t''} | F \exp \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=1}^j U(x_i, t_i) | \psi_{t'} \rangle_S; \quad (42)$$

ez (39)-ből nyerhető.

Mellékesen (41) közvetlenül egy fontos perturbációs képletre vezet. Ha U hatása kicsiny, az exponenciális U szerint első rendig menve kifejezhető; kapjuk:

$$\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_{S'} = \langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_S + \frac{i}{\hbar} \langle \chi_{t''} | \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) | \psi_{t'} \rangle. \quad (43)$$

Különösen fontos az az eset, amikor $\chi_{t''}$ olyan állapot, amelyben $\psi_{t'}$ egyáltalán nem volna megtalálható, ha az U perturbáció nem volna jelen (azaz: $\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_S = 0$). Ekkor

$$\frac{1}{\hbar^2} |\langle \chi_{t''} | \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) | \psi_{t'} \rangle_S|^2 \quad (44)$$

megadja a perturbáció által első rendben előidézett átmenet valószínűségét. A szokásos jelöléssel:

$$\langle \chi_{t''} | \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) | \psi_{t'} \rangle_S = \int \left\{ \int \chi_{t''}^* e^{-(i/\hbar) \mathbf{H}(t''-t)} U e^{-(i/\hbar) \mathbf{H}(t-t')} \psi_{t'} dx \right\} dt,$$

úgyhogy (44) az időtől függő perturbációk elméletéből megszokott kifejezésbe megy át [17].

9. Newton egyenletei

A felcserélési összefüggés

Ebben a szakaszban azt fogjuk találni, hogy különböző funkcionálok adhatnak azonos eredményt, ha azokat tetszőleges két állapottal közrefogjuk. A funkcionálok ilyen ekvivalenciája felel meg az új nyelvben az operátoregyenletekkel kifejezett állításnak.

Ha F függ az egyes koordinátáktól, definiálható természetesen a $\partial F / \partial x_k$ új funkcionál, melyet valamelyik x_k változó szerint differenciálva kapunk ($0 < k < j$). Ha $\langle \chi_{t''} | \partial F / \partial x_k | \psi_{t'} \rangle_S$ -et (39) segítségével kiszámítjuk, a jobb oldalon álló integrál tartalmazni fogja $\partial F / \partial x_k$ -t. Az x_k változó ezen kívül csak egy helyen szerepel: S -ben. Így x_k szerint parciálisan integrálhatunk. A kiintegrált rész eltűnik (feltételezve a hullámfüggvények eltűnését a végtelenben) és az integrálban a $-F(\partial / \partial x_k) \exp(iS/\hbar)$ mennyiség jelenik meg. Minthogy azonban $\partial / \partial x_k \exp(iS/\hbar) = (i/\hbar)(\partial S / \partial x_k) \exp(iS/\hbar)$, a jobb oldal $-(i/\hbar)F(\partial S / \partial x_k)$ átmeneti elemével egyenlő, azaz

$$\langle \chi_{t''} | \frac{\partial F}{\partial x_k} | \psi_{t'} \rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \langle \chi_{t''} | F \frac{\partial S}{\partial x_k} | \psi_{t'} \rangle_S. \quad (45)$$

Ez az igen fontos összefüggés mutatja, hogy két különböző funkcionál adhatja ugyanazt az eredményt tetszőleges két állapottal képezett átmeneti elemre. Azt mondjuk, hogy a két funkcionál ekvivalens, és a közöttük fennálló összefüggést szimbolikusan

így fejezzük ki:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k} \overset{*}{\leftrightarrow} \frac{\partial S}{\partial x_k}; \quad (46)$$

a $\overset{*}{\leftrightarrow}$ szimbólum azt a tényt hangsúlyozza, hogy két funkcionál, mely adott hatás mellett ekvivalens, valamely más hatás mellett nem feltétlenül ekvivalens. Nem szükséges, hogy a (46) alatt szereplő mennyiségek megfigyelhető fizikai mennyiségek legyenek. Az ekvivalencia mindazonáltal fennáll. Felhasználva (36)-ot írható:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k} \overset{*}{\leftrightarrow} F \left[\frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_k} + \frac{\partial S(x_k, x_{k-1})}{\partial x_k} \right]. \quad (47)$$

Ez az egyenlet fennáll az ε -ban nullad- és elsőrendű tagokra, és következnek belőlük az impulzusra és a koordinátára vonatkozó felcserélési összefüggések, valamint a Newton-egyenletek mátrix-alakban.

A mi egyszerű egydimenziós problémánk esetében $S(x_{i+1}, x_i)$ -t a (15) kifejezés adja meg; eszerint

$$\partial S(x_{k+1}, x_k) / \partial x_k = -m(x_{k+1} - x_k) / \varepsilon,$$

és

$$\partial S(x_k, x_{k-1}) / \partial x_k = +m(x_k - x_{k-1}) / \varepsilon - \varepsilon V'(x_k);$$

ahol $V'(x)$ a potenciál deriváltját vagyis az erőt jelöli. Ekkor (47) helyett írható:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k} \overset{*}{\leftrightarrow} F \left[-m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) - \varepsilon V'(x_k) \right]. \quad (48)$$

Ha F nem függ az x_k változótól, ez Newton mozgásegyenletét adja. Ha pl. F konstans (mondjuk $F=1$), (48)-ból ε -nal osztva kapjuk:

$$0 \overset{*}{\leftrightarrow} -\frac{m}{\varepsilon} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) - V'(x_k).$$

Eszerint a tömegszer az $[(x_{k+1} - x_k) / \varepsilon - (x_k - x_{k-1}) / \varepsilon] / \varepsilon$ gyorsulás tetszőleges két állapotot összekötő átmeneti eleme egyenlő a $-V'(x_k)$ erő ugyanezen két állapotot összekötő átmeneti elemével. Ez Newton törvénye mátrix-alakban kifejezve, mely a kvantummechanikában is fennáll.

Mi történik, ha F függ x_k -től? Legyen pl. $F = x_k$. Ekkor (48)-ból $\partial F / \partial x_k = 1$ felhasználásával kapjuk:

$$-\frac{\hbar}{i} \overset{*}{\leftrightarrow} x_k \left[-m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) - \varepsilon V'(x_k) \right]$$

vagy elhanyagolva az ε -ban magasabb rendű tagokat:

$$m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) x_k - m \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) x_k \overset{*}{\leftrightarrow} \frac{\hbar}{i}. \quad (49)$$

Ahhoz, hogy egy olyan egyenletet, amilyen (49), átírjunk a hagyományos jelölésbe, fel kell ismernünk, mely mátrix felel meg az olyan mennyiségnek, amilyen $x_k x_{k+1}$. A (39) összefüggés szemügyre vétele alapján nyilvánvaló, hogy amennyiben F -et

mondjuk $f(x_k)g(x_{k+1})$ -gyel választjuk egyenlőnek, a megfelelő operátor (40)-ben

$$e^{-(i/\hbar)(t''-t-\varepsilon)H}G(\mathbf{x})e^{-(i/\hbar)\varepsilon H}f(\mathbf{x})e^{-(i/\hbar)(t-t')H};$$

ennek mátrixelemét kell képezni a $\chi_{t''}, \psi_{t'}$, állapotok között. Az x_{k+1} függvényének megfelelő operátorok az x_k függvényének megfelelő operátoroktól balra fognak megjelenni, azaz: *a tényezők sorrendje a mátrixoperátorok valamely szorzatában megfelel a funkcionál alkotó megfelelő tényezők időbeli sorrendjének*. Eszerint, ha a funkcionál úgy írható és ténylegesen úgy is van felírva, hogy minden egyes tagban a későbbi időpontoknak megfelelő tényezők a korábbi időpontokhoz tartozó tényezőktől balra lépnek fel, úgy a megfelelő operátor azonnal felírható, a funkcionálbeli sorrendet az operátorokra vonatkozóan is megtartva [18]. A funkcionálban a tényezők sorrendjének nyilvánvalóan nincs jelentősége. A meghatározott sorrend választása csupán megkönnyíti a képletek átírását a megszokott operátorjelölésbe. Ha a (49) egyenletet az átírás megkönnyítése érdekében a kívánt módon íránk fel, a bal oldal második tagjában a tényezőket fordított sorrendbe kellene írunk. Látjuk tehát, hogy ez az egyenlet a

$$\mathbf{p}\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{p} = \hbar/i$$

összefüggésnek felel meg, ahol az $m\dot{\mathbf{x}}$ operátorra a \mathbf{p} jelölést alkalmaztuk.

A funkcionálok és a megfelelő operátorok kapcsolatát a fentiekben a tényezők időbeli sorrendje segítségével definiáltuk. Megjegyzendő, hogy e szabályhoz különös gondossággal kell ragaszkodnunk, ha a sebességeket vagy magasabb rendű deriváltakat tartalmazó mennyiségek lépnek fel. Az $(\dot{x})^2$ operátort képviselő funkcionál valójában $(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon \cdot (x_k - x_{k-1})/\varepsilon$, nem pedig $[(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon]^2$. Az utóbbi mennyiség $\varepsilon \rightarrow 0$ esetén úgy divergál mint $1/\varepsilon$. Ez belátható (49) alatt a második tagot az ε időközzel későbbi időponthoz tartozó $x_{k+1} \cdot m(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ -nal helyettesítve. Ez az egyenletet nem változtatja meg, ami az ε -ban nulladrendű tagokat illeti. Így módon (ε -nal osztva) kapjuk:

$$\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 \overset{\leftrightarrow}{s} - \frac{\hbar}{im\varepsilon}. \quad (50)$$

Ez megadja azt a korábban közölt eredményt, mely szerint a pálya két szomszédos pontja segítségével képezett $(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ „sebesség” négyzetének középértékéből vont négyzetgyök $\varepsilon^{-\frac{1}{2}}$ nagyságrendű.

Nem megfelelő tehát a kinetikus energia funkcionálját mondjuk egyszerűen az

$$\frac{1}{2}m[(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon]^2 \quad (51)$$

alakban felírni, minthogy ez a mennyiség $\varepsilon \rightarrow 0$ esetén végtelenné válik. Ténylegesen ez nem valamely megfigyelhető fizikai mennyiséget képviselő funkcionál.

A kinetikus energia fizikai funkcionálját megkaphatjuk, szemügyre véve az átmeneti amplitúdónak a részecsketömeg megváltoztatása folytán fellépő elsőrendű megváltozását. Változtassuk meg m -et $m(1 + \delta)$ -ra, egy rövid, mondjuk ε hosszúságú, a t_k környezetébe eső időtartam folyamán. A hatás megváltozása $\frac{1}{2}\delta em[(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon]^2$, melynek deriváltja (51)-hez hasonló kifejezést szolgáltat. A hatás mellett megváltoztatja m változása a dx_k -nak megfelelő A normálási állandót is. Az állandó $(2\pi\hbar ei/m)^{-\frac{1}{2}}$ -ről $(2\pi\hbar ei/m(1 + \delta))^{-\frac{1}{2}}$ -re változik, a megváltozás tehát δ -ban első

rendig $\frac{1}{2}\delta(2\pi\hbar\epsilon i/m)^{-\frac{1}{2}}$. A tömeg megváltozásának teljes hatása (38) alatt δ -ban elsőrendig

$$\langle \chi_{t'} | \frac{1}{2} \delta \epsilon i m [(x_{k+1} - x_k)/\epsilon]^2 / \hbar + \frac{1}{2} \delta |\psi_{t'} \rangle.$$

Várható, hogy az ϵ időn át tartó δ nagyságrendű változás nagyságrendben $\delta\epsilon$ -ra rug. Osztvá $\delta\epsilon i/\hbar$ -sal, a kinetikus energia funkcionálját eképpen definiálhatjuk:

$$\text{K. E.} = \frac{1}{2} m [(x_{k+1} - x_k)/\epsilon]^2 + \hbar/2\epsilon i. \quad (52)$$

Ez $\epsilon \rightarrow 0$ esetén (50)-nek megfelelően véges. Felhasználva azt az egyenletet, mely (48)-ból áll elő, ha abban F -et $m(x_{k+1} - x_k)/\epsilon$ -nal helyettesítjük, meg lehet mutatni, hogy az (52) kifejezés (ϵ nagyságrendig) egyenlő a

$$\text{K. E.} = \frac{1}{2} m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} \right) \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right) \quad (53)$$

kifejezéssel. Eszerint a sebességek hatványait tartalmazó fizikai funkcionálok a legkönnyebben oly módon nyerhetők, hogy e hatványokat a sebességek szorzatával helyettesítjük, melyben az egyes tényezők kissé eltérő időpontokhoz tartoznak.

10. A Hamilton-operátor

Az impulzus

A Hamilton-operátor a kvantummechanika szokásos megfogalmazásában centrális fontosságú. Ebben a szakaszban az ezen operátornak megfelelő funkcionált fogjuk tanulmányozni. Azon nyomban definiálhatnánk a Hamilton-funkcionált, hozzáadva a kinetikus energia (52) vagy (53) funkcionálját a potenciális energiához. Ez a módszer mesterkélt és nem tárja fel a Hamilton-operátor, valamint az idő között fennálló fontos kapcsolatot. A Hamilton-operátornak megfelelő funkcionált az állapot időbeli eltoláskor fellépő megváltozása segítségével fogjuk definiálni.

Ebből a célból egy rövid kitérőt kell tennünk, rámutatva arra, hogy az időt nem szükséges *egyenlő* közökre felosztani. Nyilvánvalóan bármely t_i pillanatokat választva kielégítő felosztást nyerünk; határártmenetkor a legnagyobb $t_{i+1} - t_i$ időköznek kell zérushoz tartania. Az S teljes hatás most az

$$S = \sum_i S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) \quad (54)$$

összeg alakjában állítható elő, ahol

$$S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt; \quad (55)$$

az integrált a t_i -beli x_i és a t_{i+1} -beli x_{i+1} között a klasszikus pálya mentén kell képezni. Egyszerű egydimenziós példánk esetére elegendő pontossággal kapjuk:

$$S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) = \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i} \right)^2 - V(x_{i+1}) \right\} (t_{i+1} - t_i); \quad (56)$$

a dx_i szerint képzett integrálhoz tartozó normálási állandó $A = (2\pi\hbar i(t_{i+1} - t_i)/m)^{-\frac{1}{2}}$.

Immár megvizsgálhatjuk H kapcsolatát az állapot időbeli eltoláskor fellépő megváltozásával. Vegyük szemügyre a $\psi(t)$ állapotot, melyet az R' téridő-tartomány definiál. Gondoljuk el most, hogy a t időben szemügyre veszünk egy másik állapotot, $\psi_\delta(t)$ -t, melyet egy másik R'_δ tartomány definiál. Tegyük fel, hogy az R'_δ tartomány pontosan azonos R' -vel, azzal a különbséggel, hogy δ időközzel korábban helyezkedik el, azaz: egészében el van tolva δ -val a múlt irányában. A berendezés, mely az R'_δ -ban helyet foglaló rendszert preparálja, megegyezik az R' -nek megfelelő berendezéssel, de δ időközzel hamarabb lép működésbe. Ha L explicite függ az időtől, azt is eltolásnak kell alávetnünk, azaz: a ψ_δ levezényeltetésére használt L_δ a ψ -nek megfelelő L -ből úgy nyerhető, hogy a t időt $t + \delta$ -val helyettesítjük. Vessük fel a kérdést: miben különbözik a ψ_δ állapot ψ -től? Annak valószínűsége, hogy a rendszert valamely rögzített R'' tartományban találjuk, R' és R'_δ esetében különböző. Vegyük szemügyre az ezen δ eltolás által megváltoztatott $\langle \chi | 1 | \psi_\delta \rangle_{S_\delta}$ átmeneti elemet. Ezt az eltolást oly módon vehetjük figyelembe, hogy az $i \leq k$ indexű t_i értékeket δ -val csökkentjük, $i > k$ mellett pedig t_i -t változatlanul hagyjuk; a t időpont feküdjék a t_{k+1} és t_k által határolt közben [19]. Ez a változás az (55)-tel definiált $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ -t nem érinti mindaddig, amíg t_{i+1} és t_i azonos értékkel változik meg. Másrésztől azonban $S(x_{k+1}, t_{k+1}, x_k, t_k)$ megváltozik $S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k - \delta)$ -ra. A dx_k szerint képezett integrál $1/A$ konstans is megváltozik $(2\pi\hbar i(t_{k+1} - t_k + \delta)/m)^{-\frac{1}{2}}$ -re. E változások hatása δ -ban elsőrendig,

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_S - \langle \chi | 1 | \psi_\delta \rangle_{S_\delta} = \frac{i\delta}{\hbar} \langle \chi | H_k | \psi \rangle_S, \quad (57)$$

a H_k Hamilton-féle funkcionált itt

$$H_k = \frac{\partial S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k)}{\partial t_k} + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} \quad (58)$$

definiálja. Az utolsó tag az $1/A$ -ban fellépő változás folyamánya és biztosítja, hogy H_k véges maradjon, ha $\varepsilon \rightarrow 0$. Az (56) kifejezést behelyettesítve kapjuk:

$$H_k = \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{t_{k+1} - t_k} \right)^2 + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} + V(x_{k+1}),$$

ami éppen a kinetikus energia (52) funkcionáljának és a $V(x_{k+1})$ potenciális energiának az összege.

A $\psi_\delta(x, t)$ hullámfüggvény természetesen ugyanazt az állapotot írja le, amelyet $\psi(x, t)$ δ idővel később fog leírni. Így (57) szoros kapcsolatban áll a (31) operátor-egyenlettel.

Megvizsgálhatjuk az időbeli eltolás által a χ végállapotban előidézett változásokat is. Természetesen semmi újat nem kapunk így, minthogy csak χ és ψ relatív eltolódásának van jelentősége. Ily módon a

$$H_k = - \frac{\partial S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k)}{\partial t_{k+1}} + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} \quad (59)$$

alternatív kifejezést kapjuk. Ez (58)-tól csupán ε nagyságrendű tagokban különbözik.

Valamely funkcionál változásának időbeli „sebességét” oly módon számítjuk ki, hogy a kezdeti és a végállapot együttes eltolásának hatását vesszük szem-

ügyre. Ez ugyanarra vezet, mintha a funkcionálnak valamely későbbi időpontban számítanánk ki az átmeneti elemét. Eredményül a

$$\frac{\hbar}{i} \dot{\mathbf{f}} = \mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{f}\mathbf{H}$$

operátor-egyenlet analogonját kapjuk.

A p_k impulzus-funkcionál hasonlóképpen definiálható a térbeli eltolás okozta változást szemügyre véve:

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_S - \langle \chi | 1 | \psi \rangle_{S_A} = \frac{i\Delta}{\hbar} \langle \chi | p_k | \psi \rangle_S.$$

A ψ_A állapot preparálása az R'_A tartomány segítségével történt, mely azonos az R' tartománnyal; csak éppen ahhoz képest Δ távolságra el van tolván a térben. (A Lagrange-függvényt, ha az explicite függ x -től, a t -nél korábbi időkre meg kell változtatnunk: $L_A = L(x, x - \Delta)$ -val kell helyettesítenünk.) Kapjuk [20]:

$$p_k = \frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_{k+1}} = - \frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_k}. \quad (60)$$

Míthogy $\psi_A(x, t)$ egyenlő $\psi(x - \Delta, t)$ -vel, ezzel p_k -nak, valamint a hullámfüggvény x szerint képezett deriváltjának szoros kapcsolata megállapítást nyert.

Az impulzusmomentum-operátorok hasonló kapcsolatban állnak az elforgatásokkal.

Az $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ függvény deriváltja t_{i+1} szerint H_i definíciójában lép fel. Az x_{i+1} szerint képezett derivált p_i -t definiálja. Azonban $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ deriváltja t_{i+1} szerint kapcsolatban áll az x_{i+1} szerint képezett deriválttal; az (55)-tel definiált $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ függvény ugyanis teljesíti a Hamilton—Jacobi-egyenletet. A Hamilton—Jacobi-egyenlet eszerint H_i -t p_i segítségével fejezi ki. Más szavakkal: azt a tényt juttatja kifejezésre, hogy valamely állapot időbeli és térbeli eltolása között kapcsolat áll fenn. Ez a gondolat közvetlenül elvezet a Schrödinger-egyenlet levezetéséhez, mely sokkal elegánsabb, mint az a levezetés, amellyel a (30) egyenletre jutottunk.

11. A megfogalmazás elégtelenségei

Az itt adott megfogalmazás több fogyatékoságban szenved. A matematikai fogalmak, melyekre szükségünk van, újak. Ez idő szerint az egyenletek jelentésének megvilágítása céljából itt szükség van az idő természetellenes és kényelmetlen felosztására. Jelentékeny javítás érhető el a funkcionálok matematikai elméletének jelöléseit felhasználva. Úgy gondoltuk azonban, hogy elméletünknek ebben az első kifejtésében ezt jobb elkerülni. Szükség van ezen kívül arra is, hogy a funkcionálok $x(t)$ argumentum-függvényeinek terében alkalmas mértéket vezessünk be [10].

Fizikai szempontból sem teljes a megfogalmazás. A kvantummechanika egyik legfontosabb jellegzetessége az unitér transzformációkkal szemben mutatott invariancia. Ezek a klasszikus mechanika kanonikus transzformációinak felelnek meg. A jelen megfogalmazásról, minthogy az a szokásos megfogalmazásokkal ekvivalens, matematikailag kimutatható, hogy az invariáns ezen transzformációkkal

szemben. A megfogalmazás azonban nem teszi *fizikailag* nyilvánvalóvá az invarianciát. Ez a fogatkozás meghatározott módon mutatkozik meg. Nem ismertettünk közvetlen eljárást a helykoordinátákon kívül más mennyiség mérésére. Valamely részecske impulzusának mérése pl. elvégezhető más részecskéken végzett helymérés útján. A tényállást elemezve eredményül kiadódik az impulzusmérés és a hullámfüggvény Fourier-transzformáltja között fennálló kapcsolat. Ez azonban eléggé kerülő út ahhoz, hogy egy ilyen fontos fizikai eredményhez eljussunk. Várható, hogy a posztulátumok általánosíthatók oly módon, hogy az „ R téridő-tartományban haladó pályák” fogalma helyét az „ R osztályba tartozó pályák” vagy az „ R tulajdonságú pályák” fogalma foglalja el. Hiányzik azonban annak általános megfogalmazása, hogy mely tulajdonságok milyen fizikai mérésnek felelnek meg.

12. Egy lehetséges általánosítás

A megfogalmazás egy nyilvánvaló általánosítást sugall. Léteznek olyan érdekes klasszikus problémák, melyek eleget tesznek a legkisebb hatás elvének, de amelyek esetében a hatás nem írható fel mint a helykoordináták és a sebességek valamely függvényének integrálja. A hatásban felléphet pl. a gyorsulás. Vagy ha pl. a kölcsönhatások nem instantán jellegűek, szerepelhet benne két különböző időponthoz tartozó koordináták szorzata, az $\int x(t)x(t+T)dt$ minta szerint. A hatás ekkor nem bontható fel kicsiny járulékok összegére, mint (10) alatt. Ennek folytán az állapot leírására nem áll rendelkezésre hullámfüggvény. Mindazonáltal definiálható az R' tartományból valamely más R'' tartományba vezető átmeneti valószínűség. A $\langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S$ átmeneti elemek elméletének nagy része átvihető erre az esetre. Egyszerűen bevezetünk egy $\langle R'' | F | R' \rangle_S$ szimbólumot a (39)-hez hasonló egyenlet segítségével, ahová azonban ψ és χ helyére a (19), (20) kifejezéseket helyettesítjük be, S pedig ekkor az általánosabb hatás kifejezését jelenti. A Hamilton-féle, valamint az impulzus-funkcionál a 10. szakasz mintájára definiálható. További részletek találhatóak a szerző disszertációjában [21].

13. Alkalmazás a téroscillátorok kiküszöbölésére

Megfogalmazásunk egy jellemző vonása, hogy a téridőbeli összefüggésekről madártávlati képet képes nyújtani. Mielőtt az x_i -kre integrálnánk valamely, a (39)-hez hasonló kifejezésben, az olyan alakban áll előttünk, hogy abba különféle F funkcionálokat helyettesíthetünk be. Tanulmányozhatjuk, hogy a kvantummechanikai rendszerben különböző időkben lejátszódó folyamatok mily módon állnak egymással összefüggésben. Abból a célból, hogy ezen kevésbé határozott észrevételeket határozottabbá tegyük, egy példát tárgyalunk.

A klasszikus elektrodinamikában pl. a terek, melyek két töltés kölcsönhatását írják le, oszcillátorok rendszere alakjában állíthatók elő. Ezen oszcillátorok mozgásegyenleteit megoldhatjuk és az oszcillátorokat lényegében véve kiküszöbölhetjük (Lienard—Wiechert-potenciálok). A nyert kölcsönhatás az egyik részecske egyik időpontbeli és a másik részecske egy másik időpontbeli mozgása között létesít összefüggést. A kvantumelektrodinamikában a teret ugyancsak oszcillátorok rendszere alakjában állítjuk elő. Az oszcillátorok mozgását azonban nem tudjuk nyomon

követni, s az oszcillátorokat nem tudjuk kiküszöbölni. Igaz, hogy a longitudinális hullámokat képviselő oszcillátorok kiküszöbölhetők. Eredményül az instantán elektrosztatikus kölcsönhatást kapjuk. Ez a kiküszöbölés, mely az elektrosztatikus kölcsönhatásra vezet, igen tanulságos, minthogy igen világosan mutatja az önkölcsönhatással kapcsolatos nehézségeket. Ténylegesen azok oly világosan jelentkeznek, hogy semmi kétségünk nem lehet, amikor eldöntjük, melyek a helytelen, elhagyandó tagok. Az egész eljárás nem relativisztikusan-invariáns, és nem az az elhagyott tag sem. Igen kíváncsi volna, ha a transzverzális hullámokat képviselő oszcillátorokat is ki lehetne küszöbölni. Ez a szokásos kvantummechanikában csaknem leküzdhetetlen problémát jelent. Azt várjuk, hogy valamely a részecske mozgása adott időpontban függ b mozgásától valamely korábbi időpontban és megfordítva. A $\psi(x_a, x_b; t)$ hullámfüggvény azonban a két részecske viselkedését csak egyazon időpontban képes leírni. Nincs rá mód, hogy nyomon kövessük, miképpen végezte mozgását b a múltban, és miként határozza meg ezáltal a viselkedését. Az egyetlen mód erre az, hogy megadjuk az oszcillátorok rendszerének állapotát a t időpontban; ez tölti be az „emlékezet” szerepét, mely számon tartja b (és a) múltbeli viselkedését.

Az itt adott megfogalmazás lehetővé teszi, hogy megoldjuk valamennyi oszcillátor mozgásproblémáját, s az oszcillátorokat kiküszöböljük a részecskéket leíró egyenletekből. Ezt könnyen meg lehet tenni. Egyszerűen meg kell oldanunk az oszcillátorok mozgásproblémáját, még mielőtt a részecskék egyes x_i változóira integrálnánk. Az integrálás az x_i -kre az, ami a múltbeli történéseknek egyetlen állapotfüggvénybe való tömörítésére vezet. Éppen ez az, amit el kívánunk kerülni. Az eredmény természetesen függ az oszcillátor kezdeti és végállapotától. Ha ezeket megadtuk, $\langle \chi_{t'} | 1 | \psi_{t'} \rangle$ -re egy (38)-hoz hasonló egyenletet kapunk, mely azonban $\exp(iS/\hbar)$ mellett további tényezőként egy csak a részecskék pályáit leíró koordinátáktól függő G funkcionált is tartalmaz.

Azt, hogy mindez miképpen történik, egy igen egyszerű példán világítjuk meg. Vegyünk szemügyre egy részecskét, melynek koordinátáját $x(t)$, Lagrange-függvényét $L(\dot{x}, x)$ jelölje. A részecske álljon kölcsönhatásban egy oszcillátorral, melynek koordinátája $q(t)$, Lagrange-függvénye $\frac{1}{2}(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)$; a kölcsönhatást a rendszer Lagrange-függvényében a $\gamma(x, t)q(t)$ tag írja le. Itt $\gamma(x, t)$ tetszőleges függvénye a részecske koordinátájának és az időnek [22]. Tegyük fel, hogy azon átmenet valószínűségét kívánjuk ismerni, mely a részecske t' időbeli $\psi_{t'}$ hullámfüggvényével és az n oszcillátor-kvantumszámmal jellemzett állapotból azon t'' időbeli állapotba vezet, amelyben a részecskét $\chi_{t''}$ írja le, az oszcillátor pedig az m -edik szinten foglal helyet. Ezt a

$$\begin{aligned} & \langle \chi_{t''} \varphi_m | 1 | \psi_{t'} \varphi_n \rangle_{S_p + S_0 + S_I} = \\ & = \int \dots \int \varphi_m^*(q_j) \chi_{t''}^*(x_j) \exp \frac{i}{\hbar} (S_p + S_0 + S_I) \psi_{t'}(x_0) \varphi_n(q_0) \frac{dx_0}{A} \frac{dq_0}{a} \dots \\ & \dots \frac{dx_{j-1}}{A} \frac{dq_{j-1}}{a} dx_j dq_j \end{aligned} \quad (61)$$

menyiség abszolútérték-négyzete szolgáltatja. Itt $\varphi_n(q)$ az n állapotban tartózkodó oszcillátor hullámfüggvénye, S_p a részecskéhez tartozó

$$\sum_{i=0}^{j-1} S_p(x_{i+1}, x_i)$$

hatás, melyet úgy számítunk ki, mintha az oszcillátor nem volna jelen,

$$S_0 = \sum_{i=0}^{j-1} \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{q_{i+1} - q_i}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{\varepsilon \omega^2}{2} q_{i+1}^2 \right]$$

az egyedül az oszcillátorhoz tartozó hatás,

$$S_I = \sum_{i=0}^{j-1} \gamma_i q_i$$

pedig [hol $\gamma_i = \gamma(x_i, t_i)$] a részecske és az oszcillátor kölcsönhatásának megfelelő hatást jelöli. Az oszcillátorhoz tartozó a normálási állandó értéke $(2\pi\epsilon i/\hbar)^{-\frac{1}{2}}$. Az exponenciális a q_i -ktől kvadratikusan függ. Így az q_i változókra $0 < i < j$ mellett az integrálás könnyen elvégezhető. A Gauss-típusú integrálok egy sorozatát kell kiszámítanunk.

Az integráció eredménye: $(2\pi i \hbar \sin \omega T / \omega)^{-\frac{1}{2}} \exp i(S_p + Q(q_j, q_0)) / \hbar$, ahol $T = t'' - t'$, $Q(q_j, q_0)$ pedig a gerjesztett harmonikus oszcillátornak megfelelő klaszikus hatás (lásd [15]). Részletesen:

$$Q(q_j, q_0) = \frac{\omega}{2 \sin \omega T} \left[(\cos \omega T) (q_j^2 + q_0^2) - 2q_j q_0 + \frac{2q_0}{\omega} \int_{t'}^{t''} \gamma(t) \sin \omega(t - t') dt + \right. \\ \left. + \frac{2q_j}{\omega} \int_{t'}^{t''} \gamma(t) \sin \omega(t'' - t) dt - \frac{2}{\omega^2} \int_{t'}^{t''} \int_{t'}^t \gamma(t) \gamma(s) \sin \omega(t'' - t) \sin \omega(s - t') ds dt \right].$$

Ennek felírása úgy történt, mintha $\gamma(t)$ az idő folytonos függvénye volna. Az integrálokat valójában Riemann-összegekre kellene felbontanunk és $\gamma(t_i)$ -t a $\gamma(x_i, t_i)$ mennyiséggel kell helyettesítenünk. Eszerint Q függ a részecske valamennyi időponthoz tartozó koordinátáitól $\gamma(x_i, t_i)$ -n keresztül, valamint az oszcillátor t' és t'' -beli koordinátáitól. A (61) mennyiség eszerint így írható:

$$\langle \chi_{t''} \varphi_m | 1 | \psi_{t'} \varphi_n \rangle_{S_p + S_0 + S_I} = \\ = \int \dots \int \chi_{t''}^*(x_j) G_{mn} \exp \left(\frac{i S_p}{\hbar} \right) \psi_{t'}(x_0) \frac{dx_0}{A} \dots \frac{dx_{j-1}}{A} dx_j = \langle \chi_{t''} | G_{mn} | \psi_{t'} \rangle_{S_p}.$$

Ez már csak a részecske koordinátáitól függ; G_{mn} -et a

$$G_{mn} = (2\pi i \hbar \sin \omega T / \omega)^{-\frac{1}{2}} \iint \varphi_m^*(q_j) \exp(iQ(q_j, q_0)/\hbar) \varphi_n(q_0) dq_j dq_0$$

képlet adja meg.

Analóg módon eljárva meg lehet mutatni, hogy az elektromágneses tér összes oszcillátora kiküszöbölhető a töltések mozgásának leírásából.

14. Statisztikus mechanika

Spin és relativitás

A méréselmélet és a kvantumstatisztika problémáit gyakran leegyszerűsíti, ha azokat az itt leírt nézőpontból szemléljük. Valamely perturbáló mérőeszköz befolyása pl. elvben ugyanúgy kiintegrálható, mint ahogy azt az oszcillátor esetében részletesen megcsináltuk. A statisztikus sűrűségmátrix meglehetősen nyilvánvaló és hasznos módon általánosítható. Ehhez az általánosításhoz (38) abszolútérték-négyzetének vizsgálata vezet. A nyert kifejezés hasonló (38)-hoz, de a változók két dx_i, dx'_i sorozatára vonatkozó integrációt tartalmaz. Az exponenciális kifejezés helyét $\exp i(S-S')/\hbar$ foglalja el, ahol S' ugyanolyan alakú függvénye x'_i -nek, mint S az x_i -nek. Erre pl. akkor van szükség, ha a téroscillátorok kiküszöbölésének eredményét akarjuk leírni, ahol is mondjuk az oszcillátorok végállapota nincs meghatározva, és csupán az m végállapotokra képezett összegre van szükségünk.

A spint be lehet formálisan vezetni. A Pauli-féle spinegyenletet a következőképpen kaphatjuk meg: A vektorpotenciált tartalmazó

$$\frac{e}{2c} (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i) + \frac{e}{2c} (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_{i+1})$$

kölcsönhatási tagot a (13)-beli $S(x_{i+1}, x_i)$ -ben az

$$\frac{e}{2c} (\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i)) + \frac{e}{2c} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_{i+1})) (\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i))$$

kifejezéssel helyettesítjük. Itt \mathbf{A} a vektorpotenciál, \mathbf{x}_{i+1} és \mathbf{x}_i a részecske t_{i+1} , ill. t_i időponthoz tartozó helyvektora, $\boldsymbol{\sigma}$ pedig a spin Pauli-féle vektormátrixa. A Φ mennyiséget most a $\prod_i \exp iS(x_{i+1}, x_i)/\hbar$ alakban kell kifejeznünk; ez különbözik az $S(x_{i+1}, x_i)$ -k összegének exponenciális kifejezésétől. Így tehát Φ most spinmátrix.

A Klein—Gordon-féle relativisztikus egyenletet is megkaphatjuk formálisan, ha a pálya jellemzőihez hozzáteszünk egy negyedik koordinátát. Ekkor a „pályát” valamely τ paraméter négy $x^{(\mu)}(\tau)$ függvénye határozza meg. A τ paraméter ε -nyi lépésként halad előre, mint az előzőekben a t változó. Az $x^{(1)}(\tau)$, $x^{(2)}(\tau)$, $x^{(3)}(\tau)$ mennyiségek a térkoordináták, $x^{(4)}(\tau)$ pedig az idő. A Lagrange-függvény

$$\sum_{\mu=1}^4 [(dx^\mu/d\tau)^2 + (e/c) (dx^\mu/d\tau) A_\mu],$$

ahol A_μ a négyespotenciál, s az összeg $\mu = 1, 2, 3$ indexű tagjai ellentétes előjellel veendő. A τ paramétertől periodikusan függő hullámfüggvényt keresve megmutatható, hogy ennek a Klein—Gordon-egyenletet kell kielégítenie. A Dirac-egyenlet a Klein—Gordon-egyenlet esetében használt Lagrange-függvény módosítása útján nyerhető; ez a módosítás analóg azzal, amelyet a nemrelativisztikus Lagrange-függvényen kellett elvégeznünk, hogy a Pauli-egyenletet nyerjük. Közvetlen eredményként a megszokott Dirac-operátor négyzete adódik.

A spinnel és a relativitással kapcsolatos ezen eredmények tisztán formális jellegűek és nem járulnak hozzá ezen egyenletek mélyebb megértéséhez. A Dirac-egyenlet leszámaztatására vannak más utak, melyek kilátást nyújtanak e fontos és szépséges egyenlet világosabb fizikai értelmezésére.

A szerző őszintén értékeli Prof. és Mrs. *H. C. Corben*, valamint Prof. *H. A. Bethe* segítőkész tanácsait. Szeretne továbbá köszönetet mondani *J. A. Wheeler*nek számos eszmecseréért, melyet vele e munka korai szakaszában folytatott.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

[1] *P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics* (The Clarendon Press, Oxford, 1935), második kiadás, 33. szakasz; ezen kívül *Physik. Zeits. Sowjetunion* 3, 64, 1933.

[2] *P. A. M. Dirac, Rev. Mod. Phys.* 17, 195, 1945.

[3] E dolgozatban a „hatás” kifejezést mindvégig a Lagrange-függvény valamely pálya mentén képezett időintegráljára alkalmazzuk. Ha ez a pálya éppen az, amelyet a mozgását klaszikusan végző részecske ténylegesen befut, az integrált megfelelőbb volna Hamilton-féle első principális függvénynek nevezni.

[4] Megfontolásaink szempontjából lényegtelen, hogy esetleg némely a, b vagy c értékek, melyek a klasszikus mechanikában megengedettek, a kvantummechanikában ki vannak zárva. Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a fellépő értékek ugyanazok, azonban némelyekhez a valószínűség zérus értéke tartozik.

[5] Feltettük, hogy b nem-elfajult állapot és így (1) fennáll. Feltehető, hogy amennyiben a kvantummechanika valamely általánosításában (1) nem volna igaz tiszta b állapotokra sem, (2) helyét várhatóan a következő foglalná el: Léteznek olyan φ_{abc} komplex számok, hogy $P_{abc} = |\varphi_{abc}|^2$. Ekkor (5) analogonja: $\varphi_{ac} = \sum_b \varphi_{abc}$.

[6] Ezen nem változtat az a megjegyzés sem, hogy B -t megmérhettük volna, ha úgy tetszett volna. A lényeges az, hogy nem mértük meg.

[7] Azt, hogy (4) ténylegesen miképpen áll elő (5)-ből, ha a rendszert mérés zavarja meg, különösen *J. v. Neumann* tanulmányozta [*Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Dover Publications, New York, 1943)]. A mérőberendezés okozta perturbációnak lényegében az a hatása, hogy megváltoztatja az interferáló komponensek fázisát mondjuk ϑ_b -vel, úgyhogy (5) $\varphi_{ac} = \sum_b e^{i\vartheta_b} \varphi_{abc}$ -be megy át. Azonban mint *v. Neumann* megmutatta, ha B -t megmérjük, a

fázistolódásoknak ismeretleneknek kell maradniuk, úgyhogy az eredményül adódó P_{ac} valószínűség φ_{ac} -nek a ϑ_b fázis minden értékére átlagolt abszolútérték-négyzete. Ily módon jutunk a (4) eredményre.

[8] Ha A és B az A , ill. B méréseknek megfelelő operátorok, és ha ψ_a és χ_b az $A\psi_a = a\psi_a$ $B\chi_b = b\chi_b$ egyenletek megoldásai, úgy $\varphi_{ab} = \int \chi_b^* \psi_a dx = (\chi_b^*, \psi_a)$. Eszerint φ_{ab} azon transzformáció $(a|b)$ transzformációs mátrixelemével egyenlő, amely az A -t diagonalizáló reprezentációból a B -t diagonalizálóba vezet.

[9] Lásd pl. *W. Heisenberg, The Physical Principles of the Quantum Theory* (University of Chicago Press, Chicago, 1930), különösen a IV. fejezet.

[10] Ha megkísérjük elkerülni a felosztást és a határármenetet, ez igen érdekes matematikai problémákat vet fel. Az $x(t)$ függvények teréhez valamilyen komplex mértéket rendelünk. Váratlan körülmények között is kaphatunk véges eredményeket annak folyamánaképpen, hogy a mérték nem mindenütt pozitív; a pályák közül a legtöbbnek megfelelő járulékok egymást jelentékeny mértékben lerontják. Ezeket az érdekes matematikai problémákat kikerüljük a felosztás alkalmazásával. Mindazonáltal, olyan érzések fognak el bennünket, amilyenek *Cavalieri* kellett, hogy elfogják, midőn az integrálszámítás felfedezése előtt kiszámította a gúla térfogatát.

[11] Feltesszük, hogy az „erőket” a skalár- és a vektorpotenciál képviselik, nem pedig a sebesség négyzetét tartalmazó tagok. Általánosabban szólva, szabad részecskén az olyan részecske értendő, melynek Lagrange-függvénye a sebességben lineáris és attól független tagok elhagyásával nyerhető.

[12] Általánosabban: olyan koordináták, amelyek mellett $L(\dot{x}, x)$ sebességben négyzetes tagjai állandó együtthatókkal lépnek fel.

[13] Ezek az integrálok valójában oszcilláló jellegűek és nem jól meghatározottak, de meghatározottá tehetők konvergencia-faktor felhasználásával. Automatikusan ilyen faktort szolgáltat (24)-ben $\psi(x-\xi, t)$. Ha úgy tetszik, formálisabb eljárás is megadható; eszerint pl. \hbar -t $\hbar(1-i\delta)$ -val kell helyettesíteni, ahol δ kicsiny pozitív szám, s ez után δ -val zárushoz kell tartani.

[14] Dr. Hartland Snyder magánbeszélgetésben felvetette előttem a következő igen érdekes lehetőséget: lehetséges, hogy a kvantummechanikának található olyan általánosítása, amelyben a kísérlettel mérhető állapotok nem preparálhatók; eszerint tehát nem volna olyan állapot, melybe a rendszert elhelyezve, valamely meghatározott kísérlet bizonyossággal adott eredményt szolgáltatna. A χ függvények osztálya ekkor nem azonos a rendelkezésre álló ψ állapotok osztályával. Ez a helyzet állna elő, ha pl. χ más differenciálegyenletnek tesz eleget, mint ψ .

[15] A (18) egyenlet ténylegesen szigorúan érvényes, $S(x_{i+1}, x_i)$ (11) alakját használva tet-szőleges ε mellett, azokban az esetekben, ha a potenciál x -et nem tartalmazza másodiknál magasabb hatványon (pl. szabad részecske, harmonikus oszcillátor). Az A állandónak azonban pontosabb értékét kell használnunk. A következőképpen definiálhatjuk A -t. Tegyük fel, hogy az x_i, t_i pontból k szabadsági fokú klasszikus részecskék indulnak ki, egyenletes sűrűséggel az impulzustérben. Írjuk fel azon részecskék számát, amelyeknek adott komponense a dp impulzusközbe esik, a dp/p_0 alakban, ahol p_0 állandó. Ekkor $A = (2\pi\hbar/p_0)^{k/2} \varrho^{-\frac{1}{2}}$, ahol ϱ e részecskék sűrűsége a k -dimenziós x_{i+1} koordinátatérben a t_{i+1} időben.

[16] Lásd ezzel kapcsolatban Schrödinger igen érdekes megjegyzéseit, Ann. d. Physik 79, 489 (1926).

[17] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (The Clarendon Press, Oxford, 1935) második kiadás, 47. szakasz, (20) egyenlet.

[18] Dirac is tanulmányozott különböző időpontokhoz tartozó mennyiségeket tartalmazó operátorokat. Lásd [2].

[19] A matematikai szigorúság szemszögéből tekintve, míg δ véges, $\varepsilon \rightarrow 0$ esetén nehézségekkel találjuk magunkat szemben, pl. azzal kapcsolatban, hogy a $t_{k+1} - t_k$ időközt végesnek választjuk. Ez azzal a feltevéssel korrigálható, mely szerint δ változik az idővel; azt $t = t_k$ előtt simán bekapcsoljuk és $t = t_k$ után simán kikapcsoljuk. Ez után határozzuk meg az elsőrendű megváltozást $\delta \rightarrow 0$ esetén. Az eredmény lényegében azonos azzal, amelyre a fent használt durva eljárás vezetett.

[20] Nem helyettesítettük be közvetlenül p -t (60)-ból (47)-be; ekkor ugyanis (47) nem volna többé igaz nulladrendben, valamint ε -ban első rendben egyaránt. A felcserélési összefüggéseket lezármasztathatnánk, de a mozgásegyenleteket nem. A (60)-beli két kifejezés a t_i -től t_{i+1} -ig terjedő időköz két végéhez tartozó impulzusokat adja meg. Ezek egymástól $\varepsilon V'(x_{k+1})$ -gyel különböznek, tekintettel az ε idő folyamán ható erőre.

[21] Az elektromágnesség azon elmélete, amelynek leírását J. A. Wheeler és R. P. Feynman adta meg [Rev. Mod. Phys. 17, 157 (1945)], kifejezhető egy legkisebb hatás elve segítségével, melyben csak a részecskék koordinátái szerepelnek. Ezen elmélet kvantálására irányuló kísérlet, mely mentes lenne a terekre való hivatkozástól, vezette el a szerzőt a kvantummechanika itt adott megfogalmazásának tanulmányozásához. Elgondolásainak kiterjesztését, mely felöleli az általánosabb hatásfüggvények esetét, doktori disszertációjában dolgozta ki („The principle of least action in quantum mechanics”, Princeton University, 1942).

[22] Nem okoz problémát az általánosítás arra az esetre, amikor γ függ a részecske \dot{x} sebességétől.

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1966. VIII. 16. – Példányszám: 600 – Terjedelem: 12,25 (A/5) ív

66-6369 – Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők.

Ára: 10,- Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,- Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

A III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskola 1965 előadásai:

<i>Dolinszky Tamás</i> : A potenciálszórás alapfeladata	487
<i>Nyíri Júlia</i> : A szórási amplitúdó analitikus tulajdonságai	511
<i>Kövesy Zsuzsa</i> : A küszöbjelenségek	529
<i>Huszár Miklós</i> : A nukleon-alakfaktorok	545
<i>Telbisz Ferenc</i> : A Born-közelítés és finomításai	555
<i>Boschán Péter</i> : Az impulzus-közelítés a szórásszámításban	563
<i>Kosály György és Solt György</i> : A lassú neutronok szóródása kristályon és folyadékon	571

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>R. P. Feynman</i> : A nemrelativisztikus kvantummechanika felépítése a téridőben	595
-------------------------------------------------------------------------------------------	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT 1965. ÉVI XIII. KÖTETÉHEZ

TÁRGYMUTATÓ

<i>Makra Zsigmond</i> : Neutron-dozimetria	1
<i>Horváth János</i> : Az entrópiánövekedés problémájáról	19
<i>Fogarassy Bálint</i> : A szilárdtestek vezetési tulajdonságairól	47
<i>Tóth Árpád</i> : Radonmérés szcintillációs módszerrel	129
<i>Szalay László, Hevesi János, Kozma László</i> : A lumineszkáló anyagok abszorpciós és fluoreszcencia spektrumai közötti kapcsolatról	157
<i>Kovács István</i> : Diszlokációk kontinuum elmélete I.	181
<i>Horváth János</i> : Megjegyzések a fluoreszcens molekulák abszorpciós és emissziós szinképének az elméletéhez	195
<i>Res Yost</i> : A Pauli-elv és a Lorentz-csoport	207
<i>Lendvay Ödön</i> : A kristálynövesztés diffúziós módszeréről	321
<i>Berényi Dénes</i> : Dinamikus magstruktúra effektusok belső konverziónál	251
<i>Deme Sándor és Csákány Antal</i> : Félvezető magsugárzás detektorok és spektrométerek I. ...	273
<i>Wigner Jenő</i> : Szimmetria és a megmaradási tételek	309
<i>Lovás István</i> : Rugalmas neutron-szóródás a C^{12} atommagon	319
<i>Máthé György</i> : Kísérleti tapasztalatok egy lassú-gyors rendszerű 10^{-8} sec tartományban működő koincidencia körrel kapcsolatban	337
<i>Berencz Ferenc</i> : A H_2 molekula $1\text{ s}ns^{-1}S$ állapotainak molekulapálya-módszeres számításai II.	353
<i>Szabó Piroska</i> : Belső súrlódási együttható meghatározása csúszó síklapos viszkoziméterrel	361
<i>Abonyi Iván</i> : A relativisztikus Boltzmann-egyenletről I.	367
<i>Chatel Péter és Kovács István</i> : A diszlokációk kontinuum-elmélete II. A rugalmas kontinuum alapegyenletei	383
<i>Berecz Endre és Gellén György</i> : Nagy elektromos vezetőképességű folyadékok és oldatok dielektromos jellemzőinek néhány mérési problémája mikrohullámú frekvencia tartományban	399
<i>Kovács István és Balázs János</i> : Rácshibák elektromos ellenállása fémekben	411
<i>Pócsik György</i> : A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei I. A térelmélet posztulátumai	419
<i>Pócsik György</i> : A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei II. A tér rekonstrukciója a vákuummértékek alapján	431
<i>Zimányi József</i> : A stripping reakciót követő gamma-sugárzás cirkuláris polarizációja	461
<i>Tompa János</i> : Nemkristályos anyagok röntgen finomszerkezetének kutatása	517

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Pauli</i> : A kizárási elv, a Lorentz-csoport és a téridő s a töltés tükrözése	107
<i>W. Heisenberg</i> : Kinematikai és mechanikai összefüggések új kvantumelméleti értelmezéséről	447
<i>M. Born and P. Jordan</i> : A kvantummechanikáról I.	529



MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT 1965. ÉVI XIII. KÖTETÉHEZ NÉVMUTATÓ

<i>Abonyi Iván:</i> A relativisztikus Boltzman-egyenletről I.	367
<i>Balázs János:</i> lásd <i>Kovács István</i>	396
<i>Berecz Endre és Gellén György:</i> Nagy elektromos vezetőképességű folyadékok és oldatok dielektromos jellemzőinek néhány mérési problémája mikrohullámú frekvenciatartományban	399
<i>Berencz Ferenc:</i> A H_2 molekula 1sns^1S állapotainak molekulapálya-módszeres számításai II.	353
<i>Berényi Dénes:</i> Dinamikus magstruktúra effektusok belső konverziónál	251
<i>Born M. és Jordan P.:</i> A kvantummechanikáról I.	529
<i>Chatel Péter és Kovács István:</i> A diszlokációk kontinuum elmélete II. A rugalmas kontinuum alapegyenletei	383
<i>Csákány Antal</i> lásd <i>Deme Sándor</i>	
<i>Deme Sándor és Csákány Antal:</i> Félvezető magsugárzás detektorok és spektrométerek I. ..	273
<i>Fogarassy Bálint:</i> A szilárdtestek vezetési tulajdonságairól	47
<i>Gellén György</i> lásd <i>Berecz Endre</i>	
<i>Heisenberg W.:</i> Kinematikai és mechanikai összefüggések új kvantumelméleti értelmezéséről	447
<i>Hevesi János</i> lásd <i>Szalay László</i>	
<i>Horváth János:</i> Megjegyzések a fluoreszcens molekulák abszorpciós és emissziós szinképének az elméletéhez	195
<i>Jordan P.</i> lásd <i>Born M.</i>	
<i>Kovács István:</i> Diszlokációk kontinuum elmélete I.	181
<i>Kovács István</i> lásd <i>Chatel Péter</i>	
<i>Kovács István és Balázs János:</i> Rácshibák elektromos ellenállása fémekben	411
<i>Kozma László</i> lásd <i>Szalay László</i>	
<i>Lendvay Ödön:</i> A kristálynövesztés diffúziós módszeréről	231
<i>Lovas István:</i> Rugalmas neutron-szóródás a C^{12} atommagon	319
<i>Makra Zsigmond:</i> Neutron-dozimetria	1
<i>Máthé György:</i> Kísérleti tapasztalatok egy lassú-gyors rendszerű 10^{-8} sec tartományban működő koincidenca körrel kapcsolatban	337
<i>Pauli W.:</i> A kizárási elv, a Lorentz-csoport és a téridő s a töltés tükrözése	107
<i>Pócsik György:</i> A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei I. A térelmélet posztulátumai	419
<i>Pócsik György:</i> A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei II. A tér rekonstrukciója a vákuumértékek alapján	431
<i>Szabó Piroska:</i> Belső súrlódási együttható meghatározása csúszó síklapos viszkoziméterrel	361
<i>Szalay László, Hevesi János, Kozma László:</i> A lumineszkáló anyagok abszorpciós és fluoreszcencia spektrumai közötti kapcsolatról	157
<i>Tompa János:</i> Nemkristályos anyagok röntgen finomszerkezetének kutatása	517
<i>Tóth Árpád:</i> Radonmérés szcintillációs módszerrel	129
<i>Wigner Jenő:</i> Szimmetria és megmaradási tételek	309
<i>Zimányi József:</i> A stripping reakciót követő gamma-sugárzás cirkuláris polarizációja	461
<i>Yost Res:</i> A Pauli-elv és a Lorentz-csoport	207

